



KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH GmbH

Institut für Festkörperforschung

**K-Schalenanregung in langsamen atomaren
Stößen**

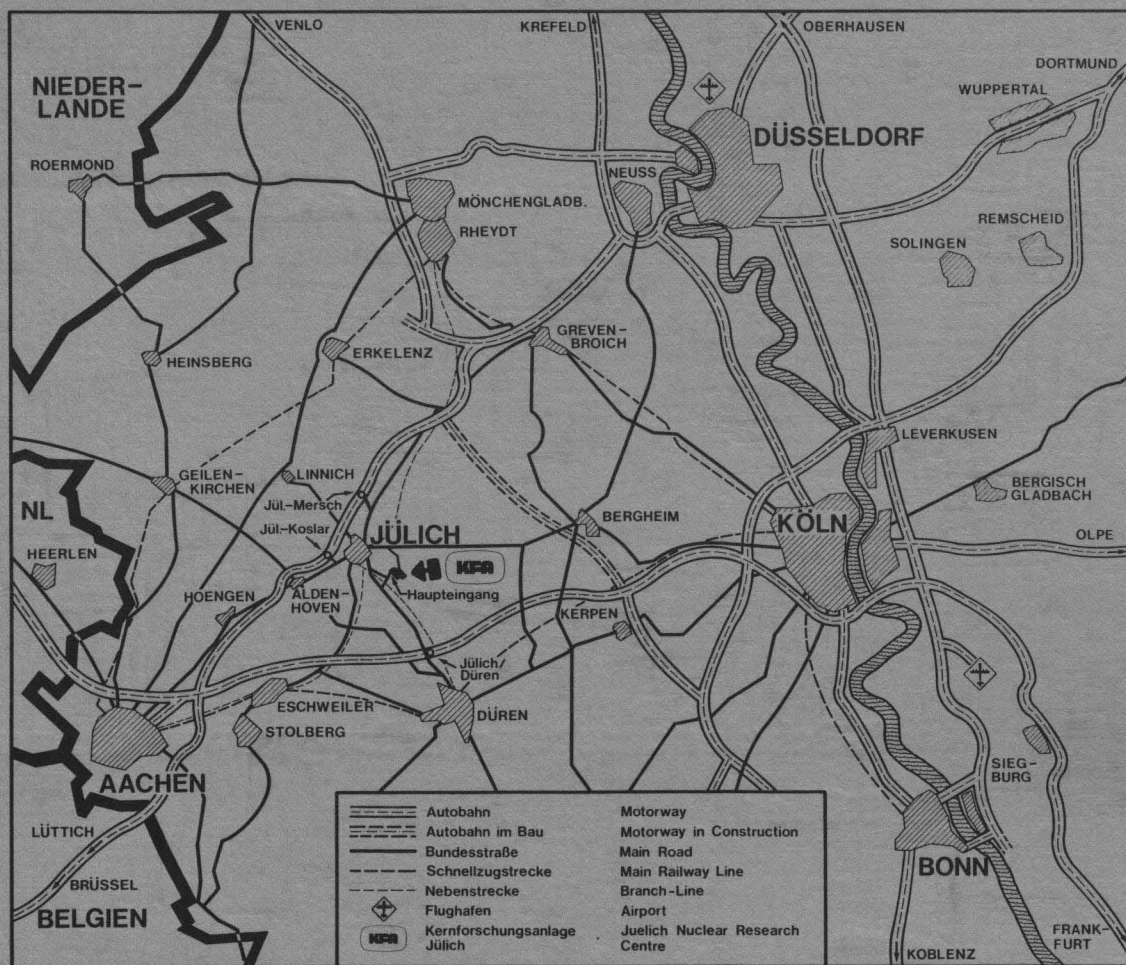
von

N. Luz

Jül - Spez - 16

Juni 1978

ISSN 0343-7639



Als Manuskript gedruckt

Spezielle Berichte der Kernforschungsanlage Jülich - Nr. 16

Institut für Festkörperforschung Jül - Spez - 16

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH,
Jülich, Bundesrepublik Deutschland

K-Schalenanregung in langsamen atomaren Stößen

von

N. Luz

D 361 (Diss. Uni. Bielefeld)

Verzeichnis häufig verwendeter Symbole

Indizes A und B beziehen sich auf Projektil bzw. Target; Indizes x und Au auf Röntgenquanten bzw. Augerelektronen.

Größen im Schwerpunktsystem sind mit ' gekennzeichnet.

a_0	Bohrscher Radius
b	Stoßparameter
E	Energie
m	Masse
N_I	Zahl der nachgewiesenen Ionen
N_K	Zahl der echten Koinzidenzen
N_T	Zahl der zufälligen Koinzidenzen
P	Anregungswahrscheinlichkeit
\bar{P}	Über Vorwärts- und Rückwärtsstreuprozesse gemittelte Anregungswahrscheinlichkeit
R	Abstand der Kerne A und B
r	Elektronenkoordinate
v	Geschwindigkeit
v_{el}	klassische Umlaufgeschwindigkeit der Hüllenelektronen
Z	Kernladungszahl
Z_s	abgeschirmte Kernladungszahl
ϑ	Streuwinkel
σ	Wirkungsquerschnitt
$\sigma(\vartheta)$	differentieller Wirkungsquerschnitt
ω_K	Fluoreszenzausbeute der K-Schale

Das System atomarer Einheiten (a.u.):

Länge: $1 \text{ a.u.} = a_0 = 0,53 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$

Energie: $1 \text{ a.u.} = 27,2 \text{ eV}$

Geschwindigkeit: $1 \text{ a.u.} = 2,18 \cdot 10^8 \text{ cm/sec}$

Beziehung zwischen der kinetischen Energie E [keV] eines Teilchens der Masse M [atomare Masseneinheiten] und der Geschwindigkeit v [a.u.] :

$$E = 25 \cdot M \cdot v^2$$

Die Umrechnung atomarer Einheiten in das System reduzierter Einheiten [r.u.] erfolgt nach den Gleichungen (2.14) und (2.15)

Inhaltsangabe

1. Einleitung	1
2. Innerschalenanregung in langsamen Ion-Atomstößen	9
2.1 Das Quasimolekül-Modell	9
2.2 K-Schalenanregung in langsamen Ion-Atomstößen	17
2.2.1 Symmetrische Stoßsysteme	17
2.2.2 Asymmetrische Stoßsysteme	24
2.2.3 Weitere, zur K-Anregung beitragende Kopplungen	27
3. Meßmethode zur Bestimmung der differentiellen K-Schalenanregung	31
3.1 Erläuterung grundlegender Begriffe	31
3.2 Messung der differentiellen K-Schalenan- regungswahrscheinlichkeit	31
4. Experimenteller Aufbau	40
4.1 Der Beschleuniger	40
4.2 Die Versuchsanordnung	41
4.2.1 Das Target	41
4.2.2 Die Ionenzähler	42
4.2.3 Das Röntgenzählrohr	44
4.2.4 Das Elektronenspektrometer	45
4.2.5 Die experimentelle Winkelunschärfe	49
4.3 Meßelektronik und Datenaufnahme	51
5. Meßergebnisse und Diskussion der Resultate	56
5.1 Stoßparameterabhängigkeit des $2p\pi - 2p\sigma$ Überganges	57

5.2 Stoßparameterabhängigkeit in Systemen ohne 2p π - Loch vor dem Stoß	64
5.3 Stoßparameterabhängigkeit der Fluoreszenz- ausbeute ω_K	67
6. Zusammenfassung und Ausblick	73
Anhang: Intensitätsverteilung bei der Aussendung von Augerelektronen durch bewegte Atome	

1. Einleitung

Seit mehr als 50 Jahren wird beobachtet, daß beim Durchgang geladener Teilchen durch Materie charakteristische Strahlung angeregt wird, wie sie beim Auffüllen von Leerstellen innerer Elektronenschalen entsteht. Als Projektile dienten zunächst energiereiche α -Teilchen aus radioaktiven Präparaten. Seit der Entwicklung von Beschleunigern für geladene Teilchen wurde es jedoch möglich, die Anregung innerer Schalen systematisch durch Variation der Projektil- und Targetsorte zu untersuchen.

Die einfachsten positiv geladenen Projektile sind Protonen und α -Teilchen. Bei Beschuß einer Vielzahl von Targets ergab sich,^{1,2)} daß die Anregung innerer Elektronenschalen durch schnelle, praktisch punktförmige Projektile gut mit der ersten Bornschen Näherung (PWBA)³⁾ beschrieben werden kann. Weitere wichtige Modelle für die Behandlung der Stoßanregung der Elektronenhülle sind die semiklassische Näherung (SCA)⁴⁾ und die BEA (binary encounter approximation)⁵⁾. Im Rahmen dieser Modelle werden die Elektronen durch die Einzentrenwellenfunktionen des Targetatoms beschrieben. Die Wirkung des Coulombfeldes des vorbeifliegenden Ions wird als kleine Störung behandelt. Der Gültigkeitsbereich dieser Modelle wird daher beschränkt durch die Bedingungen $Z_A \ll Z_B$ und / oder $v_A \gg v_{el}$. Im Fall $Z_A \ll Z_B$ ändert sich beim Stoß das Potential, in dem sich die atomaren Elektronen bewegen, nur geringfügig. Ebenso können sich bei $v_A \gg v_{el}$ die Elektronen nicht der plötzlichen Kernfeldänderung anpassen; der schnelle Vorbeiflug des Ions stellt nur eine kurz andauernde Störung dar.

Bei derartigen Stößen wird ein Hüllenelektron durch die Coulombwechselwirkung mit dem Projektil in einen unbesetzten gebundenen Zustand oder ins Kontinuum angehoben. Da die Kontinuumszustände

im allgemeinen sehr viel zahlreicher sind als die unbesetzten gebundenen Zustände, tritt vorwiegend Ionisation auf. Die übrigen Elektronen bleiben bei diesem Anregungsprozeß in ihrem Anfangszustand, da die gesamte Anregungswahrscheinlichkeit klein gegen 1 und Mehrfachanregung daher unwahrscheinlich ist. Man nennt diesen Mechanismus Coulombanregung oder Coulombionisation .

Die Modelle, die die Coulombanregung beschreiben, sind mittlerweile sehr verfeinert worden, vor allem auch um ihren Anwendungsbereich zu erweitern. So hat man bereits die Bahnkurve des Projektils im Feld des Targetatoms, sowie Bindungsenergiekorrekturen und Polarisierung der Elektronenhülle durch das geladene Projektil in den Rechnungen berücksichtigt;^{51,52)} dies ist von besonderer Bedeutung für Stöße mit $Z_A > 1$.

In all diesen Näherungen werden die totalen Ionisationsquerschnitte gut beschrieben. Auch die Skalierungseigenschaften dieser Modelle für die totalen Wirkungsquerschnitte stimmen überein.⁷²⁾ Eine Entscheidung welche Näherung die bessere ist, kann daher nur durch das Studium differentieller Querschnitte erfolgen. Da die Bahnkurven klassisch behandelt werden können,¹⁸⁾ entspricht das der Stoßparameterabhängigkeit der Anregungswahrscheinlichkeit.

Die gute Übereinstimmung der nach PWBA, BEA und SCA berechneten totalen Wirkungsquerschnitte mit experimentellen Daten der Anregung durch schnelle Protonen oder α - Teilchen ist wegen der Einschränkungen $Z_A \ll Z_B$ und $v_A \gg v_{el}$ für verallgemeinerte Stoßbedingungen nicht zu erwarten. So fand Specht⁶⁾ beim Beschuß verschiedener Targets durch Spaltungsbruchstücke, daß die Wirkungsquerschnitte für Röntgenanregung in diesen Stößen um Größenord-

nungen über den nach der PWBA berechneten Werten lagen. Specht bemerkte in der Diskussion seiner Resultate, daß bei den von ihm untersuchten Stoßprozessen die Bedingung $v_A \gg v_{el}$ nicht erfüllt war. Er versuchte deshalb, seine Ergebnisse durch die Bildung eines Quasimoleküls, das nur während der Stoßzeit existiert, zu erklären.

Etwa zur gleichen Zeit machten Fedorenko und Mitarbeiter⁸⁾ in Leningrad und Morgan und Everhart in Connecticut⁸⁾ differentielle Messungen der L-Anregung in $Ar^+ - Ar$ Stößen. Sie wiesen streuendes und gestreutes Teilchen in Koinzidenz nach und bestimmten gleichzeitig den Ladungszustand der Teilchen nach dem Stoß. Aus diesen Größen berechneten sie den inelastischen Energieverlust Q für verschiedene Ladungszustandskombinationen und fanden, daß bestimmte Q - Werte bevorzugt auftraten. Später verbesserte Afrosimov die experimentelle Methode, indem er zusätzlich noch die Energie der gestreuten Teilchen direkt bestimmte.¹⁰⁾ Fastrup et al.¹¹⁾ zeigten, daß der Q -Wert eines Stoßprozesses auch durch Messung von Energie und Streuwinkel eines der gestreuten Teilchen direkt zu bestimmen ist. Dabei ist es günstiger, diese Größen für das direkt gestreute Teilchen zu messen, da bei der Messung des Rückstoßteilchens die Meßgenauigkeit durch die thermische Bewegung der Targetatome stark beeinträchtigt wird.

Zur Deutung der Q -Wert Messungen gingen Fano und Lichten⁷⁾ wie Specht⁶⁾ von der Vorstellung aus, daß Projektil und Target während des Stoßes ein Quasimolekül bilden, bei dem sich im Verlauf des Stoßvorganges der internukleare Abstand R ändert. Sie wendeten dabei Prinzipien an, die Hund⁵⁹⁾ und Mulliken⁶⁰⁾ schon etwa vierzig Jahre früher bei der theoretischen Begründung der

Molekülspektroskopie entwickelt hatten.

Wenn die Projektilgeschwindigkeit v_A klein ist gegen v_{el} , können sich die Elektronen adiabatisch dem sich nur langsam ändernden Coulombfeld der beiden Kerne anpassen. Trägt man die Energie E der verschiedenen Elektronenniveaus über dem Kernabstand R auf, so erhält man das sogenannte Korrelationsdiagramm. Abb. 1 zeigt qualitativ ein Korrelationsschema für das Argon-Argon System, das bei entsprechender Änderung der E - und R - Skalen für alle symmetrischen Systeme gilt.

Schon Hund hat darauf hingewiesen, daß die Besonderheit dieser Korrelationen im Auftreten der sogenannten Elektronenpromotion liegt. Diese besteht darin, daß Elektronen, die im Grenzfall separierter Atome ($R = \infty$) eine niedrige Hauptquantenzahl n haben, mit Niveaus höherer Hauptquantenzahl im vereinigten Atom ($R = 0$) korrelieren können.

Erst Fano und Lichten haben die Bedeutung der Elektronenpromotion auch für die Anregung innerer Elektronenschalen im langsamen ($v_A \ll v_{el}$) Ion-Atomstoß erkannt und das Modell in eine Form gebracht, die es erlaubt, zumindest qualitative Aussagen über die Anregungsprozesse zu machen.

Am Beispiel der L - Anregung im Argon-Argon System läßt sich sehr gut zeigen, wie man sich den Anregungsmechanismus im Fano - Lichten Modell vorzustellen hat. Bei der Elektronenpromotion über das $4f\sigma^-$ - Niveau (vgl. Abb. 1) schneidet dieser besetzte Zustand eine Vielzahl anderer, zum Teil unbesetzter Niveaus. An diesen Kreuzungen kann ein Elektron in ein unbesetztes Niveau übergehen. Wird das so entstandene $4f\sigma^-$ - Loch

an den im weiteren Verlauf des Stoßes noch durchlaufenen Niveaure Kreuzungen nicht wieder aufgefüllt, dann ergibt sich nach dem Auseinanderfliegen der Kerne eine Leerstelle in der L - Schale eines der Stoßpartner. Dieser Prozeß führt zu einem diskreten Q - Wert.⁷⁾

Die L - Anregung durch Elektronenpromotion über das 4 f σ - Niveau ist sehr eingehend untersucht worden.²⁾ Es ergibt sich eine gute qualitative Übereinstimmung mit den Vorhersagen des Fano-Lichten Modells.

Eine quantitative Behandlung der Anregung über Elektronenpromotion wird im allgemeinen dadurch erschwert, daß an einer Vielzahl von dicht beieinanderliegenden Niveaure Kreuzungen Übergänge stattfinden können. Im Experiment kann man nur die Gesamtübergangswahrscheinlichkeit messen, die sich häufig in im einzelnen nicht bestimmbarer Form aus den Übergangswahrscheinlichkeiten an den verschiedenen Niveaure Kreuzungen zusammensetzt.

Eine statistische Behandlung der Ionisation innerer Schalen in Stoßsystemen mit $Z_A \approx Z_B \gg 1$ ist kürzlich von Brandt und Jones⁵²⁾ vorgeschlagen worden. Sie betrachten z. B. die K - Schalenionisation als zeitabhängiges Diffusionsproblem, in dem die K - Schale eine reflektierende und die Ionisationsgrenze eine absorbierende Grenzfläche darstellt. Die Elektronen bewegen sich in diesem Energieraum statistisch und können über "Leitern" von Niveaure Kreuzungen ins Kontinuum gelangen (statistisches Modell). Die Anwendbarkeit dieses Modells ist bisher nicht eingehend untersucht worden.

In einer quantitativen Formulierung des Promotionsmodells basierend auf individuellen Niveaure Kreuzungen ist es deshalb notwendig,

den Anregungsmechanismus an solchen Beispielen zu untersuchen, in denen nur die Wechselwirkung weniger Niveaus in Betracht kommt.

Wir haben uns daher entschieden, die K - Schalenanregung in Stoßsystemen mit der Kernladungszahl $Z \approx 10$ zu untersuchen. Bei symmetrischen Systemen ist im Fano-Lichten Modell wegen der Erhaltung der Parität überwiegend nur die Anregung über den $2p\pi - 2p\sigma$ - Rotationsübergang möglich (s. Abb. 1). Da in asymmetrischen Systemen die Parität nicht definiert ist, muß man für eine quantitative Behandlung dieser Systeme noch Übergänge zu den Niveaus $2s\sigma$ und $1s\sigma$ berücksichtigen. Die theoretische Behandlung des Neon-Sauerstoff Systems ergibt aber, daß die K - Anregung auch in asymmetrischen Systemen hauptsächlich über die $2p\pi - 2p\sigma$ - Kopplung abläuft (vgl. Abschnitt 2.2.2). Deshalb läßt sich die K - Anregung sowohl in symmetrischen als auch in asymmetrischen Stoßsystemen zunächst sehr erfolgreich mit einer Zweizustandsnäherung beschreiben.

Es muß darauf hingewiesen werden, daß der totale Wirkungsquerschnitt nach einem schwellenähnlichen Verhalten einen ziemlich monoton ansteigenden Verlauf zeigt, der unter Umständen auch mit gewissen Modifikationen im Rahmen der Modelle zur Coulombanregung erklärt werden kann.⁶⁸⁾ Wie beim Problem der Coulombionisation ist auch hier ein entscheidender Test für die Gültigkeit der Theorie die Messung des für die verschiedenen Theorien so charakteristischen Verlaufs der Anregungswahrscheinlichkeit P in Abhängigkeit vom Stoßparameter b .

In einer früheren Messung von Sackmann et al.¹³⁾ wurde die Gültigkeit der Zweizustandsnäherung für symmetrische Systeme

(hier Ne^+-Ne) durch Messung der P (b)-Funktion erstmalig gezeigt.

In diesen Experimenten wurde, ähnlich wie in den Messungen von Stein et al.¹²⁾, das aus der K - Schale emittierte Röntgenquant in Koinzidenz mit dem gestreuten Ion gemessen, um P (b) zu erhalten. Diese Meßmethode hat den Vorteil, daß der Ausgangskanal eindeutig bestimmt ist.

Ein Problem bei der Messung von Röntgen - Emission aus leichten Atomen ist die geringe Fluoreszenzausbeute ω_K der K - Schale. Sie ist definiert als $\omega_K = \sigma_K / (\sigma_K + \sigma_{Au})$. ω_K gibt also die Wahrscheinlichkeit an, mit der ein Loch in der K - Schale unter Aussendung elektromagnetischer Strahlung zerfällt. Die Fluoreszenzausbeute hängt stark von der Kernladung des angeregten Atoms ab.²⁾ Wegen der Empfindlichkeit gegenüber Änderungen in der Elektronenkonfiguration bei Anregung im Ion-Atomstoß ist ω_K auch noch von den Stoßbedingungen, vor allem der Projektilenergie, abhängig.²⁰⁾ Für die hier untersuchten Atome mit niedrigem Z ist ω_K klein (z.B. Ne: $\omega_K \approx 2\%$, O : $\omega_K \approx 0,6\%$). Das Auffüllen eines K-Schalenloches geschieht bei diesen Atomen also vorwiegend über Augerelektronen-Emission. Daher läßt sich bei leichten Atomen durch Messung der nach dem Stoß emittierten Augerelektronen die K - Schalenanregung praktisch unabhängig von der Fluoreszenzausbeute messen. Außerdem erwartet man bei vergleichbarem Raumwinkel im Röntgen- und Elektronen-Detektor eine wesentlich höhere Elektronenzählrate, was die Meßzeit erheblich verkürzt.

Wir haben uns daher entschlossen, in Erweiterung des früheren Experimentes¹³⁾, gleichzeitig sowohl die emittierten Röntgenquanten wie auch die Augerelektronen jeweils in Koinzidenz mit den

gestreuten Ionen zu messen. Auf diese Weise erhält man zum einen zuverlässig die $P(b)$ - Funktion, zum anderen bekommt man zusätzliche Information über mögliche Änderungen der Fluoreszenzausbeute ω_k als Funktion von b . Die so gewonnenen Resultate werden mit theoretischen Berechnungen der differentiellen Übergangswahrscheinlichkeit für die $2p\pi - 2p\sigma$ Kopplung verglichen, die von Briggs et al.^{15,16)} durchgeführt wurden. Die theoretische $P(b)$ - Kurve hat in symmetrischen¹⁴⁾ und asymmetrischen^{15,16)} Stoßsystemen einen fast identischen charakteristischen Verlauf: In dem in dieser Arbeit untersuchten Bereich der Relativgeschwindigkeit von Projektil und Targetatom sagt die Theorie ein scharfes Maximum bei kleinen Stoßparametern voraus (kinematisches Maximum), sowie in breites, sogenanntes adiabatisches Maximum bei mittleren Stoßparametern.

Für das $Ne^+ - Ne$ System wurde dieser Verlauf bereits experimentell bestätigt¹³⁾. Die in der vorliegenden Arbeit untersuchten Stoßkombinationen $Ne^+ - O_2$, $O^+ - Ne$, $Ne^+ - Ne$, $O^+ - O_2$, $N^+ - N_2$, $Na^+ - Ne$ und $Mg^+ - Ne$ geben weiteren Aufschluß über den Gültigkeitsbereich der existierenden Theorien, und damit insbesondere auch Hinweise auf bisher vernachlässigte Kopplungsmechanismen.

In dieser Arbeit wird durchgehend das System atomarer Einheiten (a.u.) benutzt.⁶⁵⁾

2. Innerschalenanregung in langsamen Ion-Atomstößen

2.1 Das Quasimolekül-Modell

Die Modellvorstellung der Bildung eines Quasimoleküls, das nur während der Stoßzeit existiert, hat sich für die Beschreibung von Anregungs- und Ionisationsprozessen in langsamen ($v_A \ll v_{el}$) Ion-Atomstößen als sehr fruchtbar erwiesen. Nach der qualitativen Anwendung des Quasimolekül-Modells auf die L - Schalenanregung durch Fano und Lichten⁷⁾ wurden aus diesem Modell auch quantitative Ergebnisse für die Anregung der K - Schale gewonnen. Einen ausführlichen Überblick über die Entwicklung und den Stand der theoretischen Behandlung hat kürzlich Briggs gegeben.⁶¹⁾

Eine grundlegende Vorstellung dieses Modells ist die Beschreibung innerer Elektronenniveaus durch unabhängige Eielektronen - Molekülorbitale (MO). Diese Annahme läßt sich rechtfertigen durch die Tatsache, daß die Bewegung innerer Elektronen fast ausschließlich durch die starke Coulombwechselwirkung mit den Kernen bestimmt wird. Die übrigen Elektronen tragen hauptsächlich nur zu einer Abschirmung des Coulombfeldes bei. Das Verhalten innerer Elektronen läßt sich daher qualitativ durch das einfache Modell eines Elektrons im Feld zweier nackter Kerne beschreiben. Das einfachste Beispiel für ein solches Eielektronensystem ist das Proton-Wasserstoffsystem ($H^+ - H$).

Für die Elektronen äußerer Schalen kann man die Elektron-Elektron Wechselwirkung nicht vernachlässigen. Es ist daher im allgemeinen nicht sinnvoll, diese Elektronen durch unabhängige Eielektronen-Molekülorbitale zu beschreiben.

Wenn sich im Molekül der Kernabstand nur langsam ändert, passen sich die Elektronen adiabatisch dem sich nur langsam ändernden Coulombfeld der Kerne an. Die Zustände der Elektronen können daher für jede Konfiguration der Kerne so berechnet werden, als sei der betrachtete Kernabstand fixiert (Born-Oppenheimer Näherung). Die Elektronenzustände hängen dann parametrisch vom Kernabstand R ab.

Im Rahmen dieser Näherung wird der vollständige Hamilton-Operator H für das Stoßsystem aufgespalten in einen Kernanteil H_K und einen elektronischen Anteil H_{el} .

$$H = H_K + H_{el} \quad (2.1)$$

Die Gesamtwellenfunktion Ψ ist dann als ein Produkt aus Kernanteil ϕ und Elektronenanteil χ darstellbar.

$$\Psi = \phi(R) \chi(R, \underline{r}) \quad (2.2)$$

\underline{R} und \underline{r} bezeichnen die Kern-, bzw. die Elektronenkoordinaten.

Bei festem R ist die elektronische Wellenfunktion χ nicht durch die Kernbewegung gestört und daher Eigenfunktion zum Hamiltonoperator H_{el} .

$$H_{el} \chi(R, \underline{r}) = \varepsilon(R) \chi(R, \underline{r}) \quad (2.3)$$

Aus der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$H \Psi = i \frac{\partial}{\partial t} \Psi$$

folgt mit (2.1), (2.2) und (2.3)

$$[H_K + \varepsilon(R)] \phi(R) = i \frac{\partial}{\partial t} \phi(R) \quad (2.4)$$

Diese adiabatische Näherung beruht somit darauf, daß die Wirkung von H_K auf χ vernachlässigt wird. Das bedeutet, daß keine Änderung der elektronischen Born-Oppenheimer Zustände möglich ist.

Es kann also nur elastische Streuung erfaßt werden. Inelastische

Stöße kann man durch Störungsrechnung an den stationären Zuständen (PSS-Methode) behandeln.¹⁸⁾ Da die Energien der Elektronenzustände parametrisch vom Kernabstand R abhängen, müssen die Elektronenniveaus der zunächst getrennten atomaren Stoßpartner ($R \rightarrow \infty$) im Grenzfall $R=0$ in die Energieterme eines vereinigten Atoms übergehen, dessen Kernladung $Z = Z_A + Z_B$ ist.

Die Regeln, nach denen die Niveaus der getrennten Atome mit den Energieniveaus des vereinigten Atoms korrelieren, können aus den Eigenschaften der Gesamtwellenfunktion Ψ eines Elektrons im Coulombfeld zweier Kerne abgeleitet werden. Die Lösung dieses Zweizentren-Problems läßt sich in elliptische Koordinaten separieren:⁶¹⁾

$$\Psi = X(\xi) Y(\eta) W(\varphi)$$

Dabei ist $\xi = (r_A + r_B)/R$, $\eta = (r_A - r_B)/R$; φ ist der Azimutwinkel bezogen auf die Kernverbindungsline.

Aus der expliziten Darstellung der Funktionen X , Y und W ergibt sich, daß die Zahl der Nullstellen (Knotenflächen) dieser Funktionen unabhängig von R ist.⁷³⁾ Daraus läßt sich folgende einfache Regel ableiten^{17), 61)}: Die radiale Quantenzahl $n_r = n - l - 1$ muß für $R=0$ und $R = \infty$ gleich sein. Dabei ist n die Hauptquantenzahl und l die Bahndrehimpulsquantenzahl. n_r gibt die Zahl der Knoten im Radialanteil der Gesamtwellenfunktion des vereinigten Atoms ($R=0$) und der getrennten Atome ($R=\infty$) an. Die Regel $n_r = n - l - 1 = \text{const.}$ reicht aus, um das Korrelationsdiagramm zu konstruieren, wobei mit dem energetisch tiefliegendsten Zustand begonnen wird.

Das Verfahren läßt sich an Abb. 1 verdeutlichen. Die vier $1s$ Elektronen der getrennten Atome ($n=1$, $l=0$, $n_r=0$) gehen über in das $1s$ - ($n=1$, $l=0$, $n_r=0$) und das $2p$ - ($n=2$, $l=1$, $n_r=0$)

Niveau des vereinigten Atoms. Die sogenannten Molekülorbitale, über die die Verbindung zwischen getrennten Atomen (Z_A, Z_B) und vereinigtem Atom ($Z_A + Z_B$) hergestellt wird, bezeichnet man üblicherweise mit den Quantenzahlen n und l des vereinigten Atoms, sowie mit der Projektion m_l des Bahndrehimpulses l auf die Kernverbindungsline. Die griechischen Buchstaben stehen für die Werte $\sigma \hat{=} m_l = 0, \pi \hat{=} m_l = 1, \delta \hat{=} m_l = 2, \dots$

Die Klassifizierung wurde übernommen aus dem Korrelationsschema eines einzigen Elektrons im Coulombfeld zweier unabgeschirmter Ladungen.^{59,60)} Ein Beispiel für diesen Spezialfall ist das H_2^+ Ion.

Es ist zu beachten, daß es in Eielektronen-Systemen mit reinen $1/r$ - Feldern eine zusätzliche Erhaltungsgröße gibt, analog dem Lenzschen Vektor im Kepler-Problem. Wegen dieser zusätzlichen Symmetrie können sich im H_2^+ - ähnlichen Korrelationsdiagramm Niveaus mit gleicher Projektion des Bahndrehimpulses und gleicher Parität kreuzen. In Mehrelektronensystemen gibt es wegen der Abschirmung Abweichungen vom reinen $1/r$ - Potential. Das bewirkt, daß adiabatische Eielektronenorbitale gleicher Symmetrie sich dort nicht mehr kreuzen dürfen.⁶³⁾ An derartigen "verbotenen Kreuzungen" ändert sich der Verlauf der adiabatischen Potentialenergiekurve sehr plötzlich und die adiabatischen Zustände verändern ihren Charakter, da sie nun nicht mehr mit einem Niveau gleicher radialer Quantenzahl n_r korrelieren. Ist die Energielücke an der "verbotenen Kreuzung" ausreichend klein, so kann sich im Quasimolekül während des Stoßes das Elektronensystem der raschen Änderung der Potentialkurve nicht anpassen, und die Zustände behalten ihren

Charakter (n_r) bei. Man erhält so das "diabatische" Korrelationsdiagramm (z.B. Abb. 1), für das wieder die Regel $n_r = \text{const.}$ gilt.

Da das diabatische Korrelationsdiagramm (Abb. 1) die Bewegung der Kerne in einem atomaren Stoßprozeß berücksichtigt, ist es zur Beschreibung der Dynamik des Elektronensystems bei der Anregung innerer Schalen oft besser geeignet als das adiabatische.

Am Beispiel des $4f\sigma$ - MO (vgl. Abb. 1) erkennt man, daß bei der Promotion dieses L-Schalenniveaus der getrennten Atome eine Vielzahl dicht beieinanderliegender Niveaureuzungen auftreten. Übergänge zwischen besetzten und unbesetzten Zuständen sind an diesen Stellen besonders wahrscheinlich.

Für die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit sind zwei Auswahlregeln zu beachten. Man unterscheidet folgende Fälle:

- i) Die radiale Kopplung zwischen Zuständen mit gleicher Projektion des Bahndrehimpulses auf die internukleare Achse ($\sigma-\sigma, \pi-\pi, \dots$). Sie kann im Rahmen eines von Landau und Zener⁹⁾ entwickelten Modells behandelt werden.
- ii) Die Rotationskopplung zwischen Niveaus, deren Projektion des Bahndrehimpulses sich um eine Einheit unterscheidet ($\sigma-\pi, \pi-\sigma, \dots$), soll im nächsten Abschnitt ausführlich behandelt werden.

Wegen der vielen nicht isolierten Kreuzungen bei der Elektronenpromotion über das $4f\sigma$ - MO ist die theoretische Behandlung der L-Anregung äußerst schwierig. Eine einfache Modellvorstellung²⁾ gestattet es aber, Aussagen über die Energieabhängigkeit der L-Schalenanregung im Ar zu machen.

Das $4f\sigma$ - Niveau, steigt sehr stark in einem engen Bereich des internuklearen Abstands an (Abb. 1) und kreuzt dabei viele unbesetzte Niveaus. Nimmt man an, daß wegen der vielen offenen Reaktionskanäle mit Sicherheit beide $4f\sigma$ - Elektronen in irgendein unbesetztes Niveau überwechseln, so erhält man nach dem Auseinanderfliegen der Stoßpartner zwei Löcher in der L-Schale.

Damit der beschriebene Prozeß ablaufen kann, ist es notwendig, daß der minimale Kernabstand während des Stoßes kleiner wird als ein kritischer Radius r_k (im Ar-Ar - Stoß: $r_k \approx 0,3$ a.u. (s. Abb.1)). Bei bekanntem Wechselwirkungspotential läßt sich für jede Einschußenergie E der Stoßparameter b (r_k, E) berechnen, für den der minimale Kernabstand gerade gleich r_k ist. Der totale Wirkungsquerschnitt für die Locherzeugung ist dann:

$$\sigma_{tot} = 2 \cdot \pi \cdot b^2(r_k, E)$$

Mit dieser einfachen Modellvorstellung lassen sich die von Cacak et al. gemessenen Wirkungsquerschnitte für die totale Augerelektronenemission in Argon-Argon - Stößen sehr gut wiedergeben.¹⁹⁾ Das in diesem Modell erwartete Schwellenverhalten des Wirkungsquerschnitts wird durch die experimentellen Daten von Saris und Onderdelinden²⁰⁾ reproduziert.

Im allgemeinen wird die Übergangswahrscheinlichkeit P in komplizierterer Weise vom Stoßparameter b abhängen als in dem Modell für die Ar-L - Lochanregung angenommen. Es gilt allgemein:

$$\sigma_{tot} = \int_0^{\infty} \frac{d\sigma}{db} db = 2\pi \int_0^{\infty} b \cdot P(b) db$$

Eine Messung des totalen Wirkungsquerschnitts kann somit nur indirekt Aufschluß über den Verlauf von $P(b)$ geben, da über alle Stoßparameter integriert wird. Um Details des Anregungsprozesses

zu studieren, ist es daher im allgemeinen notwendig, differenzielle Messungen durchzuführen, wie bereits in der Einleitung dargelegt.

Wegen der isolierten Lage der $2p\pi$ - $2p\sigma$ Kopplung sind (abgesehen von qualitativen Überlegungen wie oben) Berechnungen der $P(b)$ -Kurve im Rahmen des Elektronenpromotionsmodells bisher nur aus der theoretischen Behandlung der K-Anregung gewonnen worden. Für die Erzeugung eines K-Schalenlochs muß man im Rahmen des Fano-Lichten Modells zunächst nur die Wechselwirkung weniger Orbitale betrachten, wie aus Abb. 1 zu entnehmen ist. In symmetrischen Stoßsystemen ($Z_A = Z_B$) ist außerdem die Parität eine Erhaltungsgröße. Ein Übergang zwischen Niveaus unterschiedlicher Parität ist deshalb verboten. Die Parität eines Zustandes ist durch $(-1)^l$ gegeben; gerade Parität haben die Orbitale mit $l = 0, 2, 4, \dots$ (s, d, g, ...) und ungerade Parität diejenigen mit $l = 1, 3, 5, \dots$ (p, f, h, ...).

Wegen der Paritätserhaltung ist nach dem Fano-Lichten Modell in langsamen symmetrischen Stößen die K-Anregung nur über die $2p\pi$ - $2p\sigma$ - Rotationskopplung möglich. Dabei geht ein Loch aus dem $2p\pi$ - Niveau bei sehr kleinem internuklearem Abstand R in das $2p\sigma$ - MO über. Kopplungen an höher liegende Zustände werden wegen der größeren Energielücke zunächst als schwach angesehen.

Für die asymmetrischen Stoßsysteme ($Z_A \neq Z_B$) haben Barat und Lichten¹⁷⁾ gezeigt, daß man das diabatische Korrelationsdiagramm ebenfalls nach der Regel $n-1 = \text{const}$ konstruieren kann. Da aber in asymmetrischen Systemen die Parität nicht definiert ist, muß man zur Behandlung der K-Anregung mindestens die Wechselwirkung

zwischen den Molekülorbitalen $2p\pi$, $2p\sigma$, $2s\sigma$ und $1s\sigma$ betrachten.

Taulbjerg et al.^{15),16)} haben jedoch dargelegt, daß die K-Schalenanregung in leichten Stoßsystemen sowohl in symmetrischen als auch in asymmetrischen Systemen nahezu vollständig über die $2p\pi - 2p\sigma$ Rotationskopplung abläuft, wenn vor dem Stoß ein Loch im $2p\pi$ - MO vorhanden ist. Kopplungen an höhere Zustände werden dabei vernachlässigt und K-Anregung des schwereren Stoßpartners erfolgt hauptsächlich über die $2p\sigma - 1s\sigma$ Radialkopplung nach vorangegangenem $2p\pi - 2p\sigma$ Übergang. Sie konnten daher ein Skalierungsgesetz angeben, das erlaubt, für einen gegebenen Stoßprozeß die Übergangswahrscheinlichkeit $P(b)$ anzugeben und damit auch den totalen Wirkungsquerschnitt zu berechnen. (vgl. Abschnitt 2.2.2)

Da in der Theorie eine Reihe von vereinfachenden Annahmen gemacht werden,⁶¹⁾ war es ein Ziel der vorliegenden Arbeit, den Gültigkeitsbereich der theoretischen Ergebnisse für die K-Schalenanregung auszuloten. Wegen der größeren Aussagekraft wurden dazu Messungen der Stoßparameterabhängigkeit der Anregungswahrscheinlichkeit herangezogen.

Im nächsten Abschnitt sollen die Grundzüge und Annahmen der Theorie zur K-Anregung nach dem Elektronenpromotionsmodell erläutert werden.

2.2 Die K-Schalenanregung in langsamen Ion-Atomstößen

2.2.1 Symmetrische Stoßsysteme

Da für die K-Schalenanregung im Quasimolekülmodell zunächst nur die Wechselwirkung weniger Orbitale betrachtet werden muß, ist die theoretische Behandlung wesentlich vereinfacht gegenüber der L-Anregung. Wegen der Erhaltung der Parität in symmetrischen ($Z_A = Z_B$) Stoßsystemen ist bei Vernachlässigung der Kopplung an höhere Zustände dort sogar nur die $2p\pi - 2p\sigma -$ Zweizustandsnäherung erforderlich, da die Übergänge $2p\sigma - 2s\sigma$ und $2p\pi - 2s\sigma$ verboten sind (vergl. Abb. 1). Briggs und Macek¹⁴⁾ haben schon vor einigen Jahren eine Theorie für die K-Anregung in symmetrischen Stoßsystemen vorgelegt, die gut mit experimentellen Daten totaler Wirkungsquerschnitte⁶⁴⁾ und Messungen der Stoßparameterabhängigkeit der K-Anregung im $Ne^+ - Ne$ System¹³⁾ übereinstimmt. Sie haben dabei Ergebnisse und Methoden verallgemeinert, die Bates und Williams²¹⁾ bei der Behandlung des $H^+ - H$ - Systems angewandt hatten.

Im folgenden soll ein kurzer Abriß der Theorie von Briggs und Macek für K-Anregung in symmetrischen Stoßsystemen gegeben werden, die es erlaubt, die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen den beteiligten Niveaus zu berechnen.

In der Born-Oppenheimer Näherung gilt für die stationären Molekülwellenfunktionen (2.3)

$$H_{el} \chi_k(\underline{r}, \underline{R}) = \varepsilon_k \chi_k(\underline{r}, \underline{R})$$

Entwickelt man die Gesamtwellenfunktion nach diesen χ_k so erhält man in der PSS-Näherung:

$$\Psi(x, t) = \sum_k a_k(t) \chi_k(x, R) \quad (2.5)$$

Die Koeffizienten $a_k(t)$ werden durch die zeitabhängige Schrödingergleichung bestimmt, wenn sich die Summation in (2.5) über das vollständige System der χ_k erstreckt. Es ist dann:

$$(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t}) |\Psi\rangle = 0 \quad (2.6)$$

Durch Multiplikation mit $\langle \chi_i |$ und Einsetzen von (2.5) ergibt sich das System gekoppelter Differentialgleichungen²³⁾:

$$i \sum_k \langle \chi_i | \chi_k \rangle \frac{d}{dt} a_k(t) = \sum_k \langle \chi_i | H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} | \chi_k \rangle a_k(t) \quad (2.7)$$

Das Problem besteht nun darin, die Überlappintegrale $\langle \chi_i | \chi_k \rangle$ und die Übergangsmatrixelemente $\langle \chi_i | H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} | \chi_k \rangle$ zu berechnen und die gekoppelten Differentialgleichungen für die Amplituden $a_k(t)$ zu lösen.

Da sich die Kerne während des Stoßes bewegen, müssen die stationären MO so transformiert werden, daß sie für $t \rightarrow \pm\infty$ zu atomaren Wellenfunktionen werden, die sich mit gleicher Geschwindigkeit bewegen wie die zugehörigen Kerne. Bates und Mc Carrol²⁵⁾ haben gezeigt, daß es daher notwendig ist, die stationären Basisfunktionen mit einem Phasenfaktor zu multiplizieren, der die Geschwindigkeit v' der Stoßpartner im Schwerpunktsystem enthält. Eine Möglichkeit die stationären MO in das bewegte System der Kerne überzuführen, ist die Anwendung einer Galilei-Transformation, die durch den unitären Operator

$$U = \exp(i v' x - \frac{1}{2} i v'^2 t)$$

dargestellt wird. Man nennt diesen Operator auch Elektronen - Translationsfaktor, da er die Elektronen mit Impuls und Energie versieht, die der Kernbewegung entsprechen.

Da die Molekülorbitale durch Anwendung des Operators U auf verschiedene Zentren (die Kerne A und B) transformiert werden, geht die Orthogonalität der Basisfunktionen verloren. Deshalb wurden in letzter Zeit Translationsfaktoren eingeführt, die dieses Problem ausschalten.^{26,27)}

Da die Berücksichtigung der Translationsfaktoren die theoretische Behandlung erschwert, soll aus Gründen der Einfachheit hier darauf verzichtet werden. Es soll nun kurz gezeigt werden, wie man das System gekoppelter Differentialgleichungen (2.7) für die Zweizustandsnäherung der $2p\pi - 2p\sigma$ Rotationskopplung löst.

Man entwickelt die Gesamtwellenfunktion Ψ nach den beiden π und σ Zuständen²⁴⁾ (vergl. (2.5)).

$$\Psi = a_{\pi}(t) \varphi_{\pi}(x, R) e^{-i \int_{-\infty}^t \epsilon_{\pi} d\tau} + a_{\sigma}(t) \varphi_{\sigma} e^{-i \int_{-\infty}^t \epsilon_{\sigma} d\tau} \quad (2.8)$$

mit $\chi_h = \varphi_h e^{-i \int_{-\infty}^t \epsilon_h d\tau} \quad (h = \pi, \sigma)$

Für die zeitabhängigen Amplituden gelten im untersuchten Fall die Anfangsbedingungen:

$$|a_{\pi}(-\infty)| = 1, \quad |a_{\sigma}(-\infty)| = 0$$

Das bedeutet, daß sich vor dem Stoß ein Loch im $2p\pi$ Orbital befindet. Die Wahrscheinlichkeit, daß dieses Loch nach dem Stoß in das $2p\sigma$ MO übergegangen ist, ist gegeben durch

$$P = |a_{\sigma}(+\infty)|^2$$

Einsetzen von (2.8) in (2.7) liefert das System gekoppelter Differentialgleichungen:

$$\begin{aligned} [\dot{a}_{\pi} + a_{\pi} \langle \varphi_{\pi} | \dot{\varphi}_{\pi} \rangle] e^{-i \int_{-\infty}^t \epsilon_{\pi} d\tau} + a_{\sigma} \langle \varphi_{\pi} | \dot{\varphi}_{\sigma} \rangle e^{-i \int_{-\infty}^t \epsilon_{\sigma} d\tau} &= 0 \\ [\dot{a}_{\sigma} + a_{\sigma} \langle \varphi_{\sigma} | \dot{\varphi}_{\sigma} \rangle] e^{-i \int_{-\infty}^t \epsilon_{\sigma} d\tau} + a_{\pi} \langle \varphi_{\sigma} | \dot{\varphi}_{\pi} \rangle e^{-i \int_{-\infty}^t \epsilon_{\pi} d\tau} &= 0 \end{aligned} \quad (2.9)$$

Das Koordinatensystem ist so gewählt, daß die z-Achse in Richtung der Kernverbindungsline liegt und die Streuung in der x - z Ebene stattfindet. Da sich dieses System während des Stoßes dreht, gilt:²⁴⁾

$$\dot{\varphi}_k = \dot{R} \frac{\partial \varphi_k}{\partial R} + i \dot{\Theta} L_{\perp} \varphi_k \quad (2.10)$$

Dabei ist \dot{R} die Relativgeschwindigkeit der Kerne, $\dot{\Theta}$ die Winkelgeschwindigkeit, mit der sich die Kernverbindungsline dreht und L_{\perp} ist die Drehimpulskomponente senkrecht zur Streuebene.

Der erste Summand in (2.10) bewirkt die radiale Kopplung, zwischen Zuständen gleicher Symmetrie, die durch die Theorie von Landau und Zener⁹⁾ beschrieben wird. Der zweite Term in (2.10) beschreibt eine Rotationskopplung, die Zustände mit verschiedenen Projektionen des Bahndrehimpulses auf die internnukleare Achse koppelt.

Die Drehimpulskomponente L_{\perp} läßt sich im gewählten körperfesten Koordinatensystem durch die Auf- und Absteigeoperatoren L_{+} und L_{-} darstellen:²⁴⁾

$$L_{\perp} \equiv L_y = [(L_x + iL_y) - (L_x - iL_y)] / 2i = (L_{+} - L_{-}) / 2i$$

Diese Zerlegung des Drehimpulsoperators L_{\perp} zeigt, daß eine Kopplung nur zwischen Zuständen stattfindet, deren Drehimpulsprojektionen auf die Quantisierungsachse sich um eine Einheit unterscheiden. Dies gilt also auch für die hier untersuchte $2p\pi - 2p\sigma$ Kopplung.

Beachtet man noch, daß die φ_k in (2.9) normierte Eigenfunktionen des reduzierten Hamiltonoperators H_{el} bei festem R sind und nicht explizit von der Zeit abhängen, so gilt:

$$\langle \varphi_k | \dot{\varphi}_k \rangle = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \langle \varphi_k | \varphi_k \rangle = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} 1 = 0$$

Bei klassischer Beschreibung der Teilchenbahnen ist $\dot{\sigma} = v \cdot b / R^2$. Dabei ist $\underline{v} = \dot{\underline{R}}$ die Relativgeschwindigkeit der Kerne. Somit läßt sich (2.9) vereinfachen zu:

$$\begin{aligned} \dot{a}_\sigma + i \frac{v b}{R^2} a_\pi \langle \varphi_\sigma | L_y | \varphi_\pi \rangle e^{-i \int_{-\infty}^t (\epsilon_\pi - \epsilon_\sigma) d\tau} &= 0 \\ \dot{a}_\pi - i \frac{v b}{R^2} a_\sigma \langle \varphi_\sigma | L_y | \varphi_\pi \rangle e^{+i \int_{-\infty}^t (\epsilon_\pi - \epsilon_\sigma) d\tau} &= 0 \end{aligned} \quad (2.11)$$

Dieses Gleichungssystem beschreibt die Zeitabhängigkeit der Amplituden a_k ($k = \pi, \sigma$). Kennt man die Wellenfunktionen φ_k und die Energiedifferenzen $\Delta E = (\epsilon_\pi - \epsilon_\sigma)$, so läßt sich das Gleichungssystem (2.11) numerisch lösen. Die Integration von (2.11) erfolgt längs der Kerntrajektorie für einen bestimmten Stoßparameter b . Wenn das Potential bekannt ist, läßt sich bei gegebenem b auch die Trajektorie berechnen.

Die klassische Beschreibung der Trajektorien setzt folgende Bedingungen voraus:¹⁸⁾

1. Die de Broglie-Wellenlängen der Teilchen müssen klein sein gegenüber der Abschirmlänge a des Potentials.
 2. Der Streuwinkel muß gut definiert sein. D.h. für das Produkt aus Abschirmlänge und Impulsübertrag Δp muß gelten $a \cdot \Delta p \gg \hbar$.
- Wie man leicht sieht, sind diese Bedingungen bei den hier betrachteten schweren Stoßpartnern und Streuwinkeln immer erfüllt.

Aus der Integration von (2.11) erhält man damit die Übergangswahrscheinlichkeit $P(b) = |a_\sigma(+\infty)|^2$ pro Stoß in der $2p\pi - 2p\sigma$ Näherung in Abhängigkeit vom Stoßparameter.

Der Verlauf von $P(b)$ hängt von der Relativgeschwindigkeit v_A der Stoßpartner ab. Für $v_A \approx 1$ a. u. hat $P(b)$ eine ganz charak-

teristische Struktur. Wenn der Stoßparameter b das adiabatische Kriterium $b = (\epsilon_\pi - \epsilon_\sigma) / v_A$ erfüllt, dann erreicht $P(b)$ ein breites Maximum ($P(b) \approx 0,5$). Das Auftreten dieses sogenannten adiabatischen Maximums ist ziemlich unabhängig von der Form der Kerntrajektorie.^{14), 61)} Zu kleinen und großen Stoßparametern hin fällt $P(b)$ zunächst allmählich ab. Bei kleinen Stoßparametern, die großen Ablenkungswinkeln entsprechen, steigt $P(b)$ jedoch wieder an bis auf eine Wahrscheinlichkeit nahe bei eins (kinematisches Maximum). Es tritt auf bei Streuung durch 90° im Schwerpunktsystem. Da bei kleinen Stoßparametern das $2p\pi$ - und das $2p\sigma$ - MO energetisch entartet sind muß für den Übergang nur die Projektion des Bahndrehimpulses auf die internukleare Achse von π nach σ geändert werden. Wenn man bedenkt, daß bei Streuung durch 90° die Kernverbindungsline sich so schnell dreht, daß das Elektron währenddessen "stillsteht", kann man sich diesen Prozeß sehr anschaulich vorstellen.

Für das einfachste Stoßsystem, in dem sich eine $2p\pi$ - $2p\sigma$ Kopplung beobachten läßt, das Wasserstoffmolekülion H_2^+ , liegen umfangreiche Berechnungen vor.^{28, 29)} Briggs und Macek¹⁴⁾ ist es jedoch gelungen, die Ergebnisse für das H^+ - H System auch für andere symmetrische Systeme zu skalieren. Ihr Ausgangspunkt war dabei, daß sich die Energiedifferenzen der beteiligten $2p\pi$ - $2p\sigma$ -Orbitale in einem symmetrischen Molekül A_2 durch folgende Skalierungsgleichungen darstellen lassen:

$$[\epsilon_\sigma(R) - \epsilon_\pi(R)]_{A_2} = Z_s^2 [\epsilon_\sigma(R) - \epsilon_\pi(R)]_{H_2^+} \quad (2.12)$$

Dabei ist Z_s die abgeschirmte Ladungszahl, in der berücksichtigt ist, daß die Kernladung $Z = Z_A = Z_B$ des Atoms für ein bestimmtes Elektron von den übrigen $(Z - 1)$ Elektronen abgeschirmt ist.

Vergleicht man z. B. die von Larkins³⁰⁾ in einer Hartree-Fock Näherung berechneten Energiewerte für das Ne - Ne System ($Z = 10$) mit den exakt berechneten skalierten Energiedifferenzen für das $H^+ - H$ System von Bates, Ledsham und Stewart³¹⁾, so ergibt sich für $Z_s = 9,5$ nur eine Abweichung von einigen Prozent für Kernabstände $R > 0,1$ a.u. Auch für das von Briggs und Hayns³²⁾ gerechnete N-N System gilt die entsprechende Skalierungsgleichung (2.12). Für die Energiedifferenz des 1s und des 2p Zustandes des Atoms A ist ein derartiger Skalierungszusammenhang mit den entsprechenden Energiedifferenzen des Wasserstoffatoms schon länger bekannt.

Es ist nämlich¹⁴⁾:

$$[\epsilon_{1s} - \epsilon_{2p}]_A = Z_s^2 [\epsilon_{1s} - \epsilon_{2p}]_H$$

mit $Z = \frac{1}{2} Z_s > Z - 1$. Ungeklärt ist aber, wieso in den Quasimolekülen für alle Kernabstände der Z_s - Wert des isolierten Atoms die Energiedifferenzen skaliert.

Da sich die Energiedifferenzen auf diese Weise skalieren lassen, haben Briggs und Macek auch die Übergangsmatrixelemente $\langle \psi_g | L_y | \psi_r \rangle$ entsprechend umgeecht. Sie haben die Werte für das Matrixelement im A_2 System beim Kernabstand R gleich den entsprechenden Werten beim Abstand R/Z_s im H_2^+ Molekülion gesetzt. Diese recht grob erscheinende Methode wird dadurch gerechtfertigt, daß die Anregungswahrscheinlichkeit $P(b)$ ziemlich unempfindlich ist gegenüber Änderungen des Übergangsmatrixelementes. Briggs und Macek haben gezeigt, daß man z. B. in $P(b)$ nur Änderungen von etwa 10% findet, wenn man überall $\langle \psi_g | L_y | \psi_r \rangle = 1$ ansetzt.

Dieses Verhalten läßt sich aus der Struktur der gekoppelten

Differentialgleichungen erklären: Für wachsende R wird auch die Energiedifferenz $\Delta E = (\epsilon_{\pi} - \epsilon_{\sigma})$ rasch größer und die Exponentialterme ergeben schnelle Oszillationen. Bei der Integration der Gleichungen (2.11) erhält man daher nur einen Beitrag für ΔE nahe Null, wenn sich das Übergangsmatrixelement im Bereich der schnellen Oszillation nur schwach ändert.

Briggs und Macek¹⁴⁾ geben an, wie die in diesem Zusammenhang besonders wichtigen Größen Länge l und Geschwindigkeit v mit Z_s zu skalieren sind. Für symmetrische Stoßsysteme gilt:

$$\begin{aligned} l' &= l \cdot Z_s \\ v' &= v / Z_s \end{aligned} \quad (2.13)$$

2.2.2 Asymmetrische Stoßsysteme

Die K-Schalenanregung in asymmetrischen Stoßsystemen unterscheidet sich im Quasimolekülmodell von der Anregung in symmetrischen Stößen in folgenden Punkten:

1. Die Parität ist nicht definiert. Das bedeutet, daß außer der $2p\pi - 2p\sigma$ Kopplung noch die Kopplungen $2p\pi - 2s\sigma$ und $2p\sigma - 2s\sigma$ betrachtet werden müssen.
2. Die K-Schalen der getrennten Atome sind nicht entartet. Deshalb kann im Quasimolekülmodell über die $2p\pi - 2p\sigma$ Kopplung nur die K-Schale des leichten Stoßpartners angeregt werden. Am Beispiel des $\text{Ne} - \text{C}$ Systems läßt sich dieser Punkt demonstrieren. Abb. 2 zeigt ein "diabatisches" Korrelationsdiagramm für dieses System, das von Briggs und Taulbjerg¹⁵⁾ be-

rechnet wurde. Im Experiment ²²⁾ zeigt sich aber, daß auch die K-Schale des schwereren Partners meßbar angeregt wird. Daher muß zu einer vollständigen Beschreibung auch die $2p\sigma - 1s\sigma$ Kopplung berücksichtigt werden.

Insgesamt ist also in asymmetrischen Stoßsystemen mindestens eine 4 - Zustandsnäherung nötig. Briggs und Taulbjerg haben ausführlich dargelegt ¹⁵⁾ wie das System gekoppelter Differentialgleichungen (2.7) für asymmetrische Stoßpartnerkombinationen ($Z_A \neq Z_B$) bei niedrigen Relativgeschwindigkeiten zu lösen ist. Am Beispiel des Ne-O Systems haben sie die Übergangsamplituden in einer 4-Zustandsnäherung berechnet. Ausgehend von einem System adiabatischer Wellenfunktionen, die durch Hartree-Fock Rechnungen generiert wurden, haben sie mit einer unitären Transformation den Satz der vier ($1s\sigma$, $2p\sigma$, $2s\sigma$, $2p\pi$) "diabatischen" Basisfunktionen gewonnen (Abb. 2). Damit wurde unter Berücksichtigung der Translationsfaktoren (s. Abschnitt 2.2.1) das Gleichungssystem (2.7) numerisch integriert.

Sie kommen zu dem Ergebnis, daß die $2p\pi - 2p\sigma$ - Rotationskopplung die Anregung der K-Schale des leichteren Partners im asymmetrischen System sehr gut beschreiben soll. Die anderen in dieser Näherung möglichen Übergänge tragen zur K-Anregung maximal einige Prozent bei. Die schwache Anregung des schwereren Stoßpartners (hier: Ne) geschieht über die $2p\sigma - 1s\sigma$ Radialkopplung nach vorangegangenem $2p\pi - 2p\sigma$ Übergang, durch den das Loch aus der $2p\pi$ - Schale in die $2p\sigma$ - Schale übergegangen ist.

Da also die K-Anregung im Ion-Atomstoß auch in asymmetrischen Stoßsystemen im wesentlichen durch die $2p\pi - 2p\sigma$ - Kopplung

beschrieben wird, haben Taulbjerg, Briggs und Vaaben¹⁶⁾ eine Skalierung angegeben, die die K-Anregung aller Systeme beschreiben soll, soweit sie über die $2p\pi - 2p\sigma$ - Rotationskopplung erfolgt. In Abschnitt 2.2.1 wurde dargelegt, wie im Skalierungsgesetz von Briggs und Macek für symmetrische Stoßsysteme die Längen und Geschwindigkeiten mit dem Skalierungsparameter Z_s skaliert werden (2.13). In der universellen Skalierung¹⁶⁾ gilt mit zwei neuen, aber entsprechenden Parametern λ und ω folgender Zusammenhang für die Berechnung von Länge und Geschwindigkeit in reduzierten Einheiten [r. u.]

$$\begin{aligned} l' &= l \cdot \lambda \\ v' &= v / \omega \end{aligned} \quad (2.14)$$

Die Werte für diese Skalierungsparameter λ und ω geben Taulbjerg, Briggs und Vaaben auf Grund heuristischer Überlegungen¹⁶⁾ an zu:

$$\begin{aligned} \lambda^7 &= Z_1^2 Z_2^2 \left[\frac{1}{2} (Z_1 + Z_2) \right]^4 M / Z_A Z_B \\ \omega^7 &= Z_1 Z_2 \left[\frac{1}{2} (Z_1 + Z_2) \right]^2 (Z_A \cdot Z_B / M)^3 \end{aligned} \quad (2.15)$$

Dabei ist M die reduzierte Masse des Stoßsystems (A,B) mit

$$M = m_A m_B / (m_A + m_B). \text{ Für } Z_1 \text{ und } Z_2 \text{ gilt: } Z_1 = Z_A - 1; Z_2 = Z_B - 1.$$

Wie man leicht sieht, liegen λ und ω wertmäßig dicht bei der abgeschirmten Ladungszahl Z_s , worin man die Verwandtschaft der Skalierungsgesetze (2.13) und (2.14) erkennen kann. Aus den angegebenen Tabellen¹⁶⁾ läßt sich dann für ein gegebenes Stoßsystem die Anregungswahrscheinlichkeit $P(b,v)$, sowie der totale Wirkungsquerschnitt σ_{tot} entnehmen. Viele der in dieser Arbeit diskutierten theoretischen $P(b)$ -Kurven stammen daher, wenn sie nicht von Briggs⁴³⁾

gesondert für das entsprechende Stoßsystem berechnet wurden.

Für Relativgeschwindigkeiten $v \approx 0,1 \pi u.$ (vgl. (2.15)) hat $P(b)$ im Rahmen dieser universellen Skalierung die gleiche charakteristische Gestalt, wie sie im Abschnitt 2.2.1 qualitativ erläutert wurde. Es ergibt sich ein breites adiabatisches Maximum bei mittleren Stoßparametern und ein scharfes kinematisches Maximum bei kleinen Stoßparametern. Wegen dieser typischen Struktur ist die Messung von $P(b)$ ein wesentlich empfindlicherer Test für die Gültigkeit der Theorie als die Messung von σ_{tot} .

2.2.3 Weitere, zur K-Anregung beitragende Kopplungen

Aus der Diskussion der Innerschalenanregung über die Bildung eines Quasimoleküls kann man leicht verstehen, daß neben der $2p\pi - 2p\sigma$ - Rotationskopplung auch noch andere Prozesse die K-Anregung beeinflussen können.

Die Anzahl der Löcher N_π im $2p\pi$ - MO vor dem Stoß bestimmt den totalen Anregungsquerschnitt der K-Schale σ_{tot}^K . Im Rahmen der $2p\pi - 2p\sigma$ Näherung gilt: $\sigma_{tot}^K = N_\pi \sigma_{tot}^{rot}$. Dabei ist σ_{tot}^{rot} der Anregungsquerschnitt, berechnet für den Transfer eines Loches über die $2p\pi - 2p\sigma$ Rotationskopplung. In erster Näherung kann man N_π aus statistischen Überlegungen bei vorgegebenen Ionisationszustand der $2p$ - Schale bestimmen.¹⁴⁾ Es errechnet sich aus den Möglichkeiten, ein $2p$ -Loch auf die Molekülorbitale zu verteilen, die mit der $2p$ -Schale der getrennten Atome korrelieren. N_π wäre dann unabhängig von der Relativgeschwindigkeit der Kerne v_A . Es zeigt sich aber im Experiment,^{45), 71)} daß N_π auch von v_A abhängt.

Besonders deutlich zeigt sich das an folgendem: Wenn die $2p$ -Schalen der Stoßpartner, die mit dem $2p\pi$ -Orbital korrelieren (s. Abb. 1 und Abb. 2) voll aufgefüllt sind, so ist im Fano-Lichten Modell eine Anregung der K-Schale nicht möglich. Es ist aber unter anderem von unserer Gruppe am Beispiel der $\text{Na}^+ - \text{Ne}$ Stöße gezeigt worden,⁴⁴⁾ daß durch eine langreichweitige Wechselwirkung im einlaufenden Teil der Trajektorie mit endlicher Wahrscheinlichkeit ein Loch ins $2p\pi$ -Orbital gelangt.^{45),71)} Ein $2p\pi$ -Elektron wird dabei in ein höher liegendes MO oder ins Kontinuum transferiert. Dieses $2p\pi$ -Loch geht anschließend durch $2p\pi - 2p\sigma$ Kopplung in das $2p\sigma$ -MO über.

Der Loch austausch (vacancy sharing) zwischen zwei Orbitalen läßt sich für radiale Kopplung mit einem Modell von Demkov⁶⁶⁾ beschreiben, das von Meyerhof⁶⁷⁾ vereinfacht und auf Probleme der Innerschalenanregung angewandt wurde. In der Formulierung von Meyerhof ist die Übergangswahrscheinlichkeit w gegeben durch:

$$W = (1 + \exp(2x))^{-1} \quad (2.16)$$

Der Exponent ist dabei $2x = \sqrt{2} \pi (\epsilon_A^{1/2} - \epsilon_B^{1/2}) / v_A$. ϵ_A und ϵ_B sind die Bindungsenergien der Niveaus von Projektil und Target, zwischen denen der Lochtransfer stattfindet. Da die radiale Kopplung bei großem R stattfindet, kann man ϵ_A und ϵ_B mit den atomaren Bindungsenergien der Atome A und B gleichsetzen. Auch die K-Anregung des schwereren Stoßpartners im auslaufenden Teil des Stoßprozesses läuft über einen derartigen Loch austausch zwischen dem $2p\sigma$ - und $1s\sigma$ -Niveau.^{61,71)}

Meyerhof et al.⁷¹⁾ haben gezeigt, daß sich der experimentell bestimmte Verlauf von $N_\pi(v_A)$ für größere v_A gut durch Gl. 2.16 darstellen

läßt. $N_{\pi}(v_A)$ erhält man durch Division der experimentellen K-Anregungsquerschnitte durch σ_{tot}^{rot} . In (2.16) setzt man für ϵ_A die Bindungsenergie des atomaren 2p-Niveaus ein, das mit dem 2p π -MO korreliert, und $\epsilon_B \cong 0$ (Kontinuumsgrenze). Trägt man $\ln N_{\pi}(v_A)$ über α/v_A mit $\alpha = \sqrt{2} \pi \sqrt{\epsilon_A}$ auf, so stimmen die experimentellen Daten für $\alpha/v_A \lesssim 8$ trotz einiger Streuung recht gut mit dieser Näherung überein. Für kleinere v_A ($\alpha/v_A \gtrsim 8$) liegen alle experimentellen Daten deutlich über den von diesem Ansatz gegebenen Werten. Auf diesen Punkt soll bei der Diskussion der hier durchgeführten Experimente noch eingegangen werden (Abschnitt 5.2)

Neben dem Zweistufenprozeß - Erzeugung eines Loches im 2p π -MO und anschließender 2p π - 2p σ Kopplung - sind noch weitere Mechanismen vorstellbar, die zur K-Schalenanregung in Ion-Atomstößen führen können. Dies sind Übergänge aus dem 2p σ - oder 1s σ -MO zu hochliegenden Zuständen oder ins Kontinuum.

Die Anregung oder Ionisation des 2p σ -MO in einem Einstufenprozeß steht in Konkurrenz zu dem schon beschriebenen Zweistufenprozeß. Die theoretische Beschreibung der "direkten" 2p σ -Anregung kann z.B. über Skalierung von Modellrechnungen für das $H^+ - H$ System⁵⁷⁾, oder durch Anwendung einer modifizierten BEA-Näherung⁶⁸⁾ erfolgen, in der die Bindungsenergien des vereinigten Atoms ($R=0$) verwendet werden. In den Rechnungen für das $H^+ - H$ System⁵⁷⁾ wird die 2p σ -Ionisation über Radial- und Rotationskopplungen an Kontinuumszustände näherungsweise beschrieben. Beide Ansätze geben die totalen Ionisationsquerschnitte schlecht wieder.⁷¹⁾ Deshalb ist die Beschreibung der Einstufenanregung des 2p σ -MO und ihre Bedeutung für die K-Anregung noch ungeklärt.

Übergänge aus dem $1s\sigma$ -MO tragen zur K-Anregung in Ion-Atomstößen nur in stark asymmetrischen ($Z_A \ll Z_B$; $Z_A \gg Z_B$) Systemen bei.⁷⁴⁾
Im Rahmen dieser Arbeit soll deshalb auf diesen Punkt nicht näher eingegangen werden.

3. Meßmethode zur Bestimmung der differentiellen K-Schalenanregung

Im folgenden soll gezeigt werden, wie hier die Stoßparameterabhängigkeit der K-Schalenanregung gemessen wurde und welche Größen dabei von besonderer Bedeutung sind. Abb. 3 zeigt ein Prinzipbild des Versuchsaufbaus. In Ion - Atomstößen im Gastarget können Elektronen aus der K-Schale auf höherliegende Energieniveaus oder ins Kontinuum angehoben werden. Das verbleibende Loch in der K-Schale wird entweder über einen Auger-Prozeß oder über die Emission eines Röntgenquants wiederaufgefüllt. Mit der hier verwendeten Meßanordnung ist es möglich, gleichzeitig Koinzidenzen zwischen in den Laborstreuwinkel ϑ gestreuten Ionen N_I und Röntgenquanten einerseits, sowie zwischen den Ionen und Augerelektronen andererseits zu messen. Die Zahl der echten Koinzidenzen N_K ist dann ein Maß für die Anregungswahrscheinlichkeit der K-Schale.

3.1. Erläuterung grundlegender Begriffe

Im folgenden Abschnitt sollen die für das Experiment wichtigen kinematischen Größen erläutert werden.

Abb. 4 zeigt die klassische Darstellung des Bahnverlaufs von Geschosß A und Targetteilchen B im Schwerpunktsystem. Neben den Geschwindigkeitsvektoren ist der Stoßparameter b eingezeichnet, der den Minimalabstand angibt, den A und B bei fehlender Wechselwirkung erreichen würden. Die gestrichenen Größen beziehen sich auf das Schwerpunktsystem. Die Transformation vom Schwerpunktsystem ins Laborsystem geschieht durch Addition der Schwerpunktgeschwindigkeit \underline{v}_s .

Für elastische Stöße lautet der Zusammenhang zwischen Schwerpunkt-

streuwinkel ϑ'_A und Laborstreuwinkel ϑ_A ³³⁾

$$\vartheta'_A = \vartheta_A + \arctan \left(\frac{m_A/m_B \cdot \sin \vartheta_A}{\sqrt{1 - (m_A/m_B \cdot \sin \vartheta_A)^2}} \right) \quad (3.1)$$

Gibt $P(b)$ die Wahrscheinlichkeit an, daß bei einem Stoßvorgang mit Stoßparameter b ein Loch in der K-Schale erzeugt wird, so gilt für den differentiellen Wirkungsquerschnitt der K-Schalenanregung

$$d\sigma = 2\pi b P(b) db \quad (3.2)$$

Durch Integration über den Stoßparameter b erhält man den totalen Anregungsquerschnitt:

$$\sigma_{tot} = 2\pi \int b P(b) db \quad (3.3)$$

Der Stoßparameter b läßt sich nicht direkt messen. Deshalb muß er aus dem gemessenen Laborstreuwinkel ϑ'_A berechnet werden. Da der Energieverlust bei den untersuchten Stoßprozessen nur in der Größenordnung von 1 keV lag, die Geschoßenergie aber einige hundert keV betrug, kann die Streuung als praktisch elastisch behandelt werden.

Der Zusammenhang zwischen dem Schwerpunktstreuwinkel ϑ'_A und dem Stoßparameter b lautet dann: ³⁴⁾

$$\vartheta'_A = \pi - 2 \int_{r_0}^{\infty} \frac{b \cdot dr}{r^2 \sqrt{(1 - V(r)/E) r^2 - b^2}} \quad (3.4)$$

Dabei ist $V(r)$ das Wechselwirkungspotential zwischen den beiden Stoßpartnern und E die relative kinetische Energie mit

$$E = E_A \frac{m_B}{m_A + m_B}$$

E_A ist die kinetische Energie des Geschoßteilchens im Laborsystem.

r_0 gibt den Abstand nächster Annäherung von A und B während des Stoßes an.

Bei den hier untersuchten Stoßprozessen im Energiebereich von einigen hundert keV ist es zweckmäßig, das Wechselwirkungspotential durch ein abgeschirmtes Coulombpotential darzustellen:

$$V(r) = \frac{Z_A Z_B}{r} \cdot e^{-(r/a)} \quad (3.5)$$

Der exponentielle Zusatzterm zum reinen Coulombpotential berücksichtigt dabei pauschal die Abschirmung durch die Hüllenelektronen. Für den Abschirmradius a wurde der Bohr'sche Ansatz

$$a = \frac{a_0}{\sqrt{Z_A^{2/3} + Z_B^{2/3}}}$$

genommen. $a_0 = 0,53 \text{ \AA}$ ist der klassische Radius der Elektronenbahn eines Wasserstoffatoms im Grundzustand. Für das auch in dieser Arbeit benutzte System atomarer Einheiten ist a_0 die Längeneinheit.

Das Integral in (3.4) läßt sich mit dem abgeschirmten Coulombpotential (3.5) nicht geschlossen berechnen. Mit Hilfe numerischer Methoden kann man allerdings auf elektronischen Datenverarbeitungsanlagen ein derartiges Problem mit hinreichender Genauigkeit lösen.

Dazu wurde ein Fortran-Programm erstellt, das bei Eingabe des Laborstreuwinkels ϑ_A den zugehörigen Stoßparameter b nach (3.4) berechnet. Das Kernstück dieser Rechnung ist ein Programm von Bingham,³⁵⁾ mit dem die numerische Integration in Gleichung (3.4) ausgeführt wird und das uns freundlicherweise von U. Scharfer³⁶⁾ zur Verfügung gestellt wurde.

Neben dem Stoßparameter wird in dem Programm auch der klassische differentielle Wirkungsquerschnitt berechnet. Dieser ist gegeben durch³⁴⁾

$$\sigma(\vartheta'_A) = \frac{b}{\sin \vartheta'_A} \left| \frac{db}{d\vartheta'_A} \right| \quad (3.6)$$

Die Ableitungen $db/d\vartheta'_A$ müssen dabei ebenfalls numerisch berechnet werden. Die Umrechnung von (3.6) ins Laborsystem erfolgt über den Zusammenhang für die Raumwinkelemente $d\Omega'$ und $d\Omega$ ³³⁾

$$d\Omega = \frac{1 + \frac{m_A}{m_B} \cos \vartheta'_A}{\left[1 + 2 \frac{m_A}{m_B} \cos \vartheta'_A + \left(\frac{m_A}{m_B} \right)^2 \right]^{3/2}} d\Omega'$$

Ein Vergleich von mit diesem Programm berechneten Werten und den Tabellen von Bingham³⁵⁾ liefert eine sehr gute Übereinstimmung.

Daher kann man für diese Werte eine Genauigkeit von etwa 1% annehmen, wie sie auch von Bingham geschätzt wurde.

3.2 Messung der differentiellen K-Schalenanregungswahrscheinlichkeit.

Der Vorteil einer Messung an einem Gastarget ist, daß man unter Einzelstoßbedingungen arbeiten kann und deshalb Effekte, die von Mehrfachstößen herrühren könnten, vernachlässigen kann. Der Nachteil eines Gastargets gegenüber einem Festkörpertarget liegt darin, daß es schwerer zu lokalisieren ist. Die Möglichkeit, das Gasvolumen durch dünne Folien zu begrenzen, scheidet für niederenergetische schwere Ionen aus,¹³⁾ da die hier verwendeten langsamen schweren Ionen selbst in dünnen Folien gestoppt werden. Außerdem werden die Folien schnell (in Sekunden) zerstört. Bei Festkörpertargets gibt es zusätzlich charakteristische Effekte,⁶⁹⁾ die hier nicht Gegenstand der Untersuchung sein sollen.

Die Streuregion ist bei Verwendung von Festkörpertargets so gut lokalisiert, daß in den Detektoren nur Ereignisse nachgewiesen werden, die in diesem eng umgrenzten Gebiet ausgelöst werden.

In diesem Fall ist die Anregungswahrscheinlichkeit direkt proportional dem Verhältnis von echten Koinzidenzen zur Zahl der gestreuten Ionen N_I .¹²⁾

Bei unseren Messungen an dem nicht scharf lokalisierten Gastarget wurde zur Bestimmung der Anregungswahrscheinlichkeit ein anderer Weg eingeschlagen. Elektronenspektrometer und Röntgenzählrohr sehen nur einen bestimmten Targetbereich (s. Abschnitt 4.2.5). Durch die Versuchsanordnung ist gewährleistet, daß gestreute Ionen aus diesem Targetbereich in die Ionendetektoren gelangen und dort mit Sicherheit nachgewiesen werden.

Bei einer derartigen Wahl des Versuchsaufbaus muß die Zahl der echten Koinzidenzen N_K auf die Gesamtzahl S aller im Target erzeugten Röntgenquanten oder Augerelektronen normiert werden und durch den differentiellen Streuquerschnitt für das abgeschirmte Coulombpotential (3.5) dividiert werden.¹³⁾

$$c \cdot \frac{N_K}{S} = P \cdot \sigma \quad (3.6a)$$

Dabei ist c eine zunächst nicht festgelegte Normierungskonstante.

Neben den direkt in den Laborwinkel $\vartheta = \vartheta_A$ gestreuten Geschößteilchen, treffen auch angestoßene Targetteilchen ($\vartheta_2 = \vartheta$) die Ionendetektoren. Diese stammen aus Streuprozessen, in denen die Projektile in den Winkel ϑ^* gestreut werden. Zwischen ϑ^* und ϑ besteht der Zusammenhang³³⁾

$$\tan \vartheta^* = \frac{\sin 2\vartheta}{m_A/m_3 - \cos 2\vartheta}$$

Für symmetrische Stoßsysteme gilt $\vartheta^* = (\frac{\pi}{2} - \vartheta)$. Der Anteil rückgestreuter Targetteilchen kann in den Ionendetektoren wegen der dazu

unzureichenden Energieauflösung von den direkt gestreuten Projektilen nicht unterschieden werden. Es gilt daher in Abwandlung von (3.6a)¹³⁾

$$c \cdot \frac{N_K}{S} = P_1 \sigma_1 + P_2 \sigma_2 \cdot \Delta \quad (3.6b)$$

Die Indizes 1 und 2 symbolisieren den direkten und den Rückwärtsstreuprozeß. Der Faktor Δ berücksichtigt den Raumwinkelunterschied für Vorwärts- und Rückwärtsstreuung in asymmetrischen Stoßsystemen. In symmetrischen Systemen ist $\Delta = 1$. Eine relative, gemittelte Produktion T von Röntgenquanten, bzw. Augerelektronen erhält man dann durch:

$$T = \frac{N_K}{S (\sigma_1 + \Delta \sigma_2)}$$

T ist also eine mit den Streuquerschnitten gewichtete Mittelung über die direkten und die Rückstreuprozesse mit der Dimension eines reziproken Wirkungsquerschnitts.

Will man den so ermittelten Wert T mit der Theorie vergleichen, so muß man ebenso aus den ungemittelten theoretischen Werten P_1 und P_2 für die Anregungswahrscheinlichkeit den Mittelwert

$$\bar{P} = \frac{P_1 \sigma_1 + P_2 \sigma_2 \Delta}{\sigma_1 + \sigma_2 \Delta} \quad (3.7)$$

berechnen.

Der Beitrag der rückgestreuten Teilchen nimmt jedoch mit kleiner werdendem Laborstreuwinkel rasch ab. In symmetrischen Stoßsystemen ist dieser Beitrag für $\vartheta_A = \vartheta_B = 45^\circ$ gerade 50%. Bei Streuwinkeln $\vartheta_A \approx 20^\circ$ ist er bereits auf etwa 1% abgesunken. Obwohl dieser Beitrag bei gegebenem Laborstreuwinkel ϑ_A sowohl von der Energie als auch von der Stoßpartnerkombination abhängt, kann man für $\vartheta_A < 20^\circ$ in den hier untersuchten Fällen setzen:

$$\bar{P} = c \cdot T \approx P_1$$

Wie man aus (3.6a) ersieht, muß die Normierungskonstante c die Dimension eines Wirkungsquerschnitts haben. Man kann diese Konstante dadurch bestimmen, daß man die Beziehung zwischen differentiell und totalem Wirkungsquerschnitt (3.3) ausnutzt:¹³⁾

$$\sigma_{tot} = 2\pi \int_0^{\infty} \bar{P}(b) b db = 2\pi c \int_0^{\infty} T(b) b db \quad (3.8)$$

Das Einsetzen des Wertes \bar{P} statt des korrekten P_1 ist hier erlaubt, da \bar{P} nur bei sehr kleinen Stoßparametern merklich von P_1 verschieden ist. Diese kleinen Stoßparameter tragen aber zum totalen Wirkungsquerschnitt wegen der Wichtung mit b nur sehr wenig bei.

Bei bekanntem totalen Wirkungsquerschnitt σ_{tot} für Röntgen- oder Augerelektronenproduktion läßt sich aus (3.8) die Normierungskonstante c bestimmen.

Kürzlich ist von Lutz et al.⁷⁰⁾ eine andere Methode angegeben worden, eine absolute Skala für $\bar{P}(b)$ zu finden. Man geht dabei von folgendem Zusammenhang für die Zahl der echten Koinzidenzen N_K aus:

$$N_K = N_I \cdot n_t \cdot (\sigma_1 + \sigma_2 \Delta) \cdot \delta\Omega \cdot \bar{P}(b) \cdot \epsilon \quad (3.9)$$

In (3.9) treten als noch nicht definierte Größen auf: n_t die Zahl der Targetatome pro cm^2 , $\delta\Omega$ der Raumwinkel der Ionendetektoren, ϵ die Nachweiswahrscheinlichkeit des Elektronenspektrometers bzw. des Röntgenzählrohres.

Für die Zahl S der nachgewiesenen Elektronen oder Röntgenquanten gilt:

$$S = N_I \cdot n_t \cdot \sigma_{tot} \cdot \varepsilon \quad (3.10)$$

Aus der Kombination von (3.9) und (3.10) ergibt sich:

$$\bar{P}(b) = \sigma_{tot} \frac{N_k}{(\sigma_1 + \sigma_2 \Delta) \delta \Omega} \quad (3.11)$$

Um aus (3.8) oder (3.11) $P(b)$ zu berechnen, muß der totale Wirkungsquerschnitt σ_{tot} für Röntgen- bzw. Augerelektronenemission bekannt sein. Diese Größe läßt sich mit unserem Versuchsaufbau nicht direkt messen, da n_t nicht bestimmbar ist.

Der Raumwinkel der Ionenzähler $\delta \Omega$ ist gegeben durch $\delta \Omega = d\Omega_{bl} f$. Dabei ist $d\Omega_{bl} = 2\pi \sin \vartheta d\vartheta$ der durch die Ringblende vor den Ionenzählern aufgespannte und vom Target aus eingesehene Raumwinkel. f ist der Bruchteil dieses Raumwinkels, der durch aktive Zählerfläche belegt ist. f berechnet man aus der geometrischen Anordnung der Zähler hinter der Ringblende; es verändert sich mit dem Streuwinkel ϑ ,¹³⁾ da die Zähleroberfläche 5mm hinter der Blendenvorderkante liegt. Tabelle 1 gibt die Werte von $\delta \Omega$ an, die für einen Ionenzähler bei Annahme eines punktförmigen Targets errechnet wurden.

ϑ	$d\Omega_{Bl} [10^{-3} \text{sterad}]$	$f [10^{-2}]$	$\delta\Omega [10^{-4} \text{sterad}]$
36°	131,8	4,017	52,98
27°	86,54	4,233	36,64
12°	19,92	4,268	8,501
8°	9,039	4,228	3,822
6°	5,121	4,206	2,154
$4,7^\circ$	3,153	4,183	1,319
$2,97^\circ$	1,263	4,153	0,5247
$2,33^\circ$	0,7782	4,144	0,3225

Tabelle 1: Raumwinkel $\delta\Omega$ für einen Ionenzähler als Funktion von ϑ . Mittlerer Blendenradius $\bar{r}_B = 40 \text{ mm}$, Blendenöffnung $dr = 3 \text{ mm}$

4. Experimenteller Aufbau

4.1 Der Beschleuniger

Abb. 5 zeigt ein Prinzipbild des 400 kV Ionenbeschleunigers der KFA Jülich, der von der Firma Nucletec S.A. in Genf gebaut wurde. In der Quelle, die sowohl mit gasförmigen als auch mit festen Stoffen beschickt werden kann, brennt bei geeignetem Betriebszustand eine magnetfeldunterstützte Hohlkathodenentladung. Durch Hochlegen der Quelle auf ein Potential von + 30 kV werden in der Entladung gebildete positive Ionen extrahiert. Mit austretendes Gas wird direkt hinter der Quelle von zwei Öl-Diffusionspumpen abgepumpt. Dadurch kann ein Druck von etwa 10^{-6} Torr im Vakuumsystem des Beschleunigers erreicht werden. Durch ionenoptische Abbildungssysteme kann der Strahl in geeigneter Weise fokussiert werden. Die Vielfalt der aus der Quelle extrahierten Ionen wird in einem 90° Analysiermagneten nach Massen getrennt. Erst nach dieser Massenseparation erfolgt die Nachbeschleunigung in einem Potentialgefälle von bis zu 400 kV. Dadurch ist gewährleistet, daß nur die Ionensorte nachbeschleunigt wird, mit der experimentiert werden soll. Dieses Vorgehen hat zwei Vorteile: Erstens wird die Strombelastung der Beschleunigungsstrecke klein gehalten, und zweitens kann man die Ionenenergie im Strahl variieren, ohne die Ionenquellenparameter und die Feldstärke im Analysiermagneten zu ändern. Mit dem Schaltmagneten kann dann der Ionenstrahl in 5 verschiedene Strahlrohre gelenkt werden, an denen die Experimentiereinrichtungen aufgebaut sind.

4.2 Versuchsanordnung

4.2.1 Das Target

Abb. 6 zeigt eine Übersichtsdarstellung des Strahlenganges in der Nähe des Streuzentrums. Durch ein System von Blenden wird der Ionenstrahl des 400 kV Beschleunigers auf einen Durchmesser von etwa 1 mm kollimiert. Die erreichte Strahldivergenz liegt bei $0,1^\circ$. Durch 3 sorgfältig justierte Blenden vor dem Streuzentrum wird die Schlitzstreuung, die bei Schwerionenexperimenten häufig sehr störend ist, nahezu vollständig unterdrückt.

In der Streuzone wird durch ein System von 5500 in einem Zylinder von 6,3 mm Durchmesser gebündelten Stahlkapillaren³⁷⁾ mit einem Innendurchmesser von je 50μ und einer Länge von 3 mm das Targetgas über ein Dosierventil eingelassen. Dieses Kapillarsystem soll für eine gewisse Richtwirkung des Gasstrahls sorgen und so die eigentliche Streuregion besser lokalisieren. Turbopumpen, von denen eine dem Gaseinlaß direkt gegenübersteht, halten bei geöffnetem Gaseinlaß in der übrigen Apparatur ein Druck von etwa 10^{-5} Torr aufrecht. In der Targetregion wird der Druck auf etwa 10^{-4} Torr geschätzt.

Wegen der schlechten Lokalisierung des Targets gelangen auch Ionen in die Ionenzähler, die in nicht vom Elektronenspektrometer oder Röntgenzählrohr eingesehenen Targetbereichen gestreut werden. Dadurch erhöht sich zwar die Ionenzählrate und damit die Zahl zufälliger Koinzidenzen $N_T = N_I \cdot S \cdot \tau$ (τ = Akzeptanzzeit des ZAK (s.4.3)), aber die Bestimmung von $\bar{P}(b)$ wird nicht beeinflusst, da die Berechnung über die Zahl S der nachgewiesenen Augerelektro-
nen bzw. Röntgenquanten erfolgt. (s.Gl.3.6)

Auf die Wände der Targetkammer auftreffende Ionen können dort Störstrahlung auslösen. Deshalb wurde das gesamte Targetgehäuse innen mit Graphitspray besprüht. Dadurch kann hauptsächlich nur niederenergetische Kohlenstoff K Störstrahlung produziert werden, die sich vom Zerfall eines K-Loches im betrachteten Stoßsystem gut diskriminieren läßt.

4.2.2 Die Ionenzähler

Zum Nachweis der gestreuten Ionen sind hinter einer Ringblende bis zu 6 Silizium-Oberflächensperrschichtzähler angebracht. Durch Verschieben dieses Zähler-Blendensystems längs der Strahlachse lassen sich verschiedene Laborstreuwinkel zwischen 45° und $0,9^\circ$ einstellen. Dabei müssen zwei verschiedene Zählerhalterungen eingesetzt werden. Eine Halterung für den Winkelbereich von 45° bis 2° hat einen mittleren Blendenradius von $\bar{r}_B = 40$ mm und eine Blendenöffnung $dr = 3$ mm. Für den Bereich von 4° bis $0,9^\circ$ wird eine Halterung mit $\bar{r}_B = 17,35$ mm und $dr = 1$ mm verwendet. Das auf einem fahrbaren Schlitten montierte Zähler-Blendensystem wurde mit einer Genauigkeit von $\pm 0,3$ mm optisch auf die Mitte der Streukammer justiert. Die so festgelegte Achse wurde anschließend durch Verschieben der gesamten Targetkammer mit der Strahlachse zur Deckung gebracht. Bei den vorliegenden Experimenten wurden in der Regel 4 Ionenzähler, mit einer empfindlichen Fläche von je 100mm^2 eingesetzt (Schwerionenzähler der Firma Ortec³⁸). Da bei den hier auftretenden relativ niedrigen Ionenenergien das Nutzsignal dicht über dem Zählerrauschen liegt, wurden verschiedene Maßnahmen ergriffen, das Signal-Rauschverhältnis zu verbessern:

1. Durch Kühlung der Zähler wird das Rauschen stark herabgesetzt. Mit einer durch ein Kühlaggregat (Firma Balzers, Typ TKZ 350) umgepumpten Mischung aus Wasser und Frostschutzmittel Glysantin werden die Zähler auf eine Temperatur von etwa -5°C gekühlt. Mit dem vorhandenen Aggregat konnte keine tiefere Temperatur erreicht werden. Unsere Versuche ergaben aber auch, daß weitere Kühlung (bis -30° vom Hersteller erlaubt³⁸⁾) das Zählerrauschen nur unwesentlich beeinflusst.
2. Verkleinern der Eingangskapazität am Vorverstärker. Zu diesem Zweck wurden die Sperrschichtzähler in der Vakuumkammer durch möglichst kurze Koaxialkabel niedriger Kapazität mit den Vorverstärkern verbunden, wobei diese direkt im Vakuum eingesetzt wurden.
3. Aufsummieren der Zählerimpulse erst nach den Hauptverstärkern und Impulshöhendiskriminatoren. Durch diese Maßnahme wird das Rauschen der Einzelzähler nicht aufsummiert und hat somit keinen Einfluß auf das Signal-Rauschverhältnis der Summenpulse.

Die genannten Maßnahmen erbrachten das gewünschte Resultat, den Signal-Rauschabstand zu vergrößern. Allerdings mußte in Kauf genommen werden, daß wegen der kurzen Verbindungen zwischen den Detektoren und den Vorverstärkern die Zähler nur noch über eine Strecke von etwa 25 cm frei verfahrbar sind.

Durch den Beschuß mit schweren Ionen verschlechtert sich im Laufe der Zeit das Rauschverhalten und die Energieauflösung der Detektoren³⁸⁾. Bei Streuung in große Winkel ist der Energieverlust der gestreuten Ionen groß und daher der Signal-Rausch-

abstand klein. Um über alle gemessenen Winkel einen möglichst großen Abstand von Nutzsignal und Rauschen zu erzielen, haben wir deshalb zunächst bei großen Streuwinkeln gemessen und sind dann zu kleinen Winkeln übergegangen¹³⁾; bei den kleineren Streuwinkeln ist die Energie der auf die Zähler treffenden Teilchen größer, allerdings nimmt wegen des starken Ansteigens des Streuquerschnitts mit abnehmenden Winkeln die Strahlenschädigung im Zählmaterial auch stark zu.

Eine Verschlechterung der Energieauflösung der Zähler ist in diesem Experiment nicht kritisch, solange die Signale deutlich vom Rauschen getrennt werden können, da die Detektoren nur als Ja-Nein-Zähler arbeiten. Die Nachweiswahrscheinlichkeit der verwendeten Detektoren ist praktisch 100%; sie eignen sich daher besonders für den Einsatz in derartigen Koinzidenzexperimenten, da die Zahl der Koinzidenzen direkt proportional der Nachweiswahrscheinlichkeit der Zähler ist.

4.2.3 Das Röntgenzählrohr

Die aus dem Gastarget emittierten Röntgenquanten wurden unter 90° zur Strahlachse in einem Proportional-Durchflußzählrohr nachgewiesen (Firma Siemens, Typ F). Durch zwei gegenüberliegende Fenster, die von dünnen Kunststofffolien verschlossen sind, können die Röntgenstrahlen in das Zählvolumen eintreten. Diese Fenster sind auf der Innenseite mit Al bedampft, um ein Aufladen der Folien zu vermeiden und das elektrische Feld zwischen Zählendraht und Gehäuse möglichst wenig zu verzerren.

In den durchgeführten Experimenten wurde eine $1\ \mu$ Polypropylen-

folie in dem zum Target hingewandten Fenster verwendet (Firma Siemens). Derartig dünne Folien sind nicht absolut gasdicht, so daß das Zählrohrgas, eine Mischung von 90% Argon und 10% Methan, allmählich ausströmt. Deshalb kann das Zählrohr nur im Durchflußbetrieb arbeiten. Um zu verhindern, daß das austretende Zählrohrgas in die Streuregion gerät, wurde vor der Zählrohrfolie noch eine dünne Kollodiumfolie angebracht (s. Abb. 6) und der Zwischenraum mit einer Vorpumpe evakuiert.

Man kann abschätzen, daß die in das Zählrohr eintretenden Röntgenquanten mit ca. 1 keV Energie auf einer Strecke in der Größenordnung von einigen Millimetern im Zählrohrgas absorbiert werden. Dadurch ist der Laufzeitunterschied der Sekundärelektronen am Zählendraht sehr klein und die Pulsanstiegszeit kurz. Man erreicht daher mit niederenergetischen Röntgenquanten Koinzidenzauflösungszeiten, die in diesem Experiment vergleichbar sind mit denen aus Elektron-Ion Koinzidenzen. Mit wachsender Energie der Röntgenquanten verschlechtern sich die Verhältnisse, weil die Absorptionslängen im Zählrohrgas größer werden und die Zählrohrimpulse deshalb langsamer ansteigen.

Der Raumwinkel des Zählrohres bezogen auf den Targetmittelpunkt betrug ungefähr 2,8%¹³⁾

4.2.4 Das Elektronenspektrometer

Die nach Ion-Stößen im Gastarget emittierten Augerelektronen werden ebenfalls unter 90° zum Primärstrahl in einem dem Röntgendetektor gegenüberstehenden Elektronenspektrometer (Firma Leybold, Typ LH 10) analysiert und nachgewiesen. Das Spektrometer besteht aus einem halbkugelförmigen Kondensator mit einer vorgeschalteten,

aus 4 Elementen aufgebauten Rohrlinse (s. Abb. 6). Mit dieser Rohrlinse wird ein Bereich des Targets auf den Eintrittsspalt des Halbkugelkondensators abgebildet; gleichzeitig werden die Elektronen in der Linse um einen einstellbaren Faktor abgebremst. Die in den Kugelkondensator eintretenden Elektronen werden nach ihrer Energie analysiert und bei Ablenkung um 180° auf den Austrittsspalt fokussiert.³⁹⁾ In einem offenen 17-stufigen Sekundärelektronen - Vervielfacher (Firma EMI, Typ 9643) werden die nach der Energie separierten Augerelektronen nachgewiesen. Gegen magnetische Felder ist das gesamte Spektrometer durch eine Mü-Metallhülle abgeschirmt.

Die Verzögerung der Elektronen in einer elektrostatischen Bremslinse hat einmal den Vorteil, daß die Energieauflösung einstellbar ist; zum anderen kann durch die Abbildung auf den Eintrittsspalt und eine geeignete Blende in der Bremslinse der Untergrund unterdrückt werden, der von schnellen, auf die Wände des Spektrometers treffen den Elektronen erzeugt wird.⁴⁰⁾

In einem Koinzidenzexperiment, wie wir es durchgeführt haben, wäre es wünschenswert, alle aus der K-Schale in den Akzeptanzbereich des Spektrometers emittierten Elektronen zu sehen. Die Elektronenspektren in Ion-Atomstößen nehmen aber wegen der Vielzahl der möglichen Übergänge, sowie der Dopplerverbreiterung der Linien²⁾ einen Energiebereich von ca. 60 eV (FWHM) ein, während das Spektrometer ein Energieintervall von nur etwa 20 eV akzeptiert. Es wurde deshalb versucht, die Auflösung des Spektrometers so weit wie möglich zu verringern, um einen möglichst großen Teil des Spektrums gleichzeitig zu erfassen. Dazu wurden Ein- und Austrittsspalt weit geöffnet. Die erreichte Energieauflösung wurde mit einer ähnlichen Elektronenquelle getestet, wie sie auch von Stolterfoht⁴¹⁾

verwendet wurde. Diese Quelle besteht aus einem 70mm langen Rohr vom Durchmesser 20mm. Auf der Rohrachse ist ein dünner heizbarer Wolframdraht aus einer Glühbirne angebracht. Der Draht wird gegenüber der Rohrwand auf ein einstellbares negatives Potential gelegt. Dadurch werden Glühelektronen mit definierter Energie durch ein mit einem feinmaschigen Gitter abgedeckten Fenster in der Rohrwandung emittiert. Es ergab sich für das Spektrometer eine relative Energieauflösung $\Delta E/E$ von etwa 3% (FWHM).

In der von uns verwendeten Betriebsart ist der Bremsfaktor B der Verzögerungslinse konstant mit $B = E/E_B = 3$ gewählt, wobei E die Elektronenenergie am Entstehungsort und E_B beim Eintritt in den Kugelkondensator ist. Bei konstantem Bremsfaktor ist die Intensität am Austrittsspalt des hemisphärischen Analysators direkt proportional der Elektronenenergie E ,⁴⁰⁾ wenn die Intensität am Eintrittstubus der Bremslinie von der Energie unabhängig ist.

Durch Beschleunigung der Elektronen zwischen Target und Bremslinse läßt sich also die Zählrate der nachgewiesenen Elektronen entsprechend steigern. Diese Möglichkeit wurde in einigen Fällen ausgenutzt, in denen nur Koinzidenzen zwischen Augerelektronen und gestreuten Ionen gemessen wurden. Die Elektronen wurden dann zwischen zwei Drahtnetzen mit einer Durchlässigkeit von 90% auf etwa 3 E beschleunigt, indem man das Netz, das mit dem Gehäuse des Gastargets verbunden war, auf ein entsprechendes negatives Potential legte. (s. Abb. 6)

Da somit das gesamte Gastargetgehäuse gegenüber dem geerdeten Eintrittstubus des Elektronenspektrometers auf elektrisch negatives Potential gelegt wird, besteht bei höheren Gegenspannungen die

Gefahr einer Gasentladung zwischen der Zählrohrfolie des Röntgenzählrohres und der Kollodiumfolie (vergl. Abschnitt 4.2.3) . Durch derartige Entladungen können die Folien sehr schnell zerstört werden. Deshalb wurde bei allen Messungen, in denen Elektronenspektrometer und Röntgenzählrohr gleichzeitig eingesetzt waren - d.h. bei fast allen Experimenten - eine Vorspannung des Gastargetgehäuses von - 40 V nicht überschritten. Ohnehin wird dabei in den meisten Experimenten die Meßzeit von der Koinzidenzrate im Röntgenzweig bestimmt.

Beim ersten Testen des Elektronenspektrometers am Ionenstrahl zeigte sich unter dem Spektrum der aus der K-Schale emittierten Augerelektronen ein unerwünscht hoher Untergrund, der bei den Messungen mit der Testquelle nicht beobachtet wurde. Die Vermutung lag nahe, daß dieser Untergrund wenigstens zum Teil von niederenergetischen positiven Ionen herrührte, die in das Spektrometer gestreut werden. Der Versuch, diesen Untergrund mit einer positiven Gegenspannung zu unterdrücken, war erfolgreich. Mit einer Spannung von 40 V (s.o.) reduzierte sich der Untergrund um etwa einen Faktor 4. Höhere Spannungen brachten keine weiteren merklichen Verbesserungen.

Bei einer Auflösung $\Delta E/E=3\%$ (FWHM) kann das gesamte Spektrum der Augerelektronen aus der K-Schale (bei fester Einstellung des Spektrometers auf das Maximum der Energieverteilung) nicht vollständig erfaßt werden. So hat z.B. das Elektronenspektrum aus der Sauerstoff K-Schale sein Maximum bei etwa 455 eV mit einer Breite von 60 eV (FWHM). Um Koinzidenzen aus dem gesamten Spektrum gleichmäßig zu erhalten, wurde mit dem Spektrometer ein Bereich von ± 100 eV um das Maximum herum überstrichen, und Zählimpulse syn-

chron dazu in einem Vielkanalanalysator abgespeichert (MCS-Betrieb, s. Abschnitt 4.3). Ein Hochlauf des Spektrometers über diesen 200 eV-Bereich war auf den relativ kurzen Zeitraum von 1 Minute festgesetzt, um Schwankungen des Ionenstroms bei Meßzeiten in der Größenordnung von Stunden herauszumitteln. Am Ende des Spektrometerhochlaufs werden die Spannungen an der Bremslinse und dem Kugelkondensator innerhalb etwa einer Sekunde auf die Anfangswerte zurückgesetzt. Während dieses Zeitintervalls wurde die Datenaufnahme für das gesamte Experiment unterbrochen.

4.2.5 Die experimentelle Winkelunschärfe

Bei gut lokalisiertem Target, z.B. bei einem Festkörpertarget, läßt sich die relative Winkelunschärfe

$$\frac{\Delta \vartheta}{\vartheta} = \frac{(\vartheta_{\max} - \vartheta_{\min}) / 2}{\vartheta} \quad (4.1)$$

direkt angeben.¹²⁾ Bei unseren Experimenten mußten wir jedoch ein schlecht lokalisiertes Gastarget verwenden (vergl. Abschnitt 3.2).

In diesem Fall geht in die Berechnung der Winkelunschärfe als weitere Komponente der Bereich des Gastargets ein, der von dem Röntgenzählrohr oder dem Elektronenspektrometer gesehen wird. Beim Röntgenzählrohr läßt sich diese Targetlänge bei Kenntnis der Konstruktionsdetails aus geometrischen Überlegungen bestimmen.¹³⁾

Für das Elektronenspektrometer ist eine solche geometrische Bestimmung nicht möglich, da die genauen Abbildungseigenschaften der Bremslinse unbekannt sind.

Wir haben uns daher entschlossen, die von dem Elektronenspektrometer und dem Röntgenzählrohr eingesehene Targetlänge experimentell zu bestimmen. Dazu wurden auf Kohlenstoffträgern dünne Aluminiumschichten mit einer Dicke von etwa 150 Å aufgedampft. An Luft oxydieren

Aluminiumoberflächen zu Al_2O_3 . Die K-Schale des Sauerstoffs in dieser Verbindung wurde durch Protonenbeschuß angeregt. Sauerstoff wurde als Target ausgewählt, da alle Messungen mit Elektronenenergien im Bereich von einigen hundert eV durchgeführt wurden. Die Sauerstoff K-Linie konnte trotz hohen Untergrundes von etwa 80% sicher identifiziert werden. Das Al_2O_3 - Target wurde entlang dem Ionenstrahl an den Detektoren vorbeigeführt. Das Ergebnis dieser Bestimmung der eingesehenen Targetlänge ist in Abb. 7 aufgetragen. Dort ist die Abhängigkeit der Zählrate bei gleichem Strahlstrom von der Entfernung zum Targetmittelpunkt entlang der Richtung des Ionenstrahls aufgezeichnet.

Bestimmt man nun die eingesehene Targetlänge l_T zwischen den Punkten, bei denen die maximale Zählrate auf 10% abgefallen ist, so ergibt sich für das Elektronenspektrometer $l_T \cong 14,5 \text{ mm}$ und für das Röntgenzählrohr $l_T \cong 7,3 \text{ mm}$. Aus der Anordnung der Kollimationsblenden und der Ringblende vor den Ionenzählern, sowie der Kenntnis von l_T lassen sich aus geometrischen Überlegungen ϑ_{\max} und ϑ_{\min} bestimmen und nach (4.1) $\Delta\vartheta/\vartheta$ berechnen. Diese prozentualen Winkelunschärfen sind in Abhängigkeit vom Laborstreuwinkel ϑ_{Lab} in Abb. 8 aufgetragen. Bei großen Streuwinkeln überwiegt der Einfluß der Targetlänge l_T auf die Winkelunschärfe. Bei kleinen Streuwinkeln werden die Winkeldivergenz und der Durchmesser des Strahls dominant.

Die auf diese Art bestimmten Winkelunschärfen stellen eine Abschätzung nach oben dar. Bei der Bestimmung der eingesehenen Targetlänge wurde ja ein Target gleicher Dichte am Elektronen- bzw. Röntgendetektor vorbeigeführt. Bei realen Experimentierbedingungen fällt aber wegen der Richtwirkung der Einlaßdüse die Dichte des Gastargets mit zunehmender seitlicher Entfernung von der Einströmdüse

ab. Man erhielte daher bei Anwendung gleicher Kriterien für die effektive Targetlänge einen geringeren Wert. Das würde dann vor allem bei großen Streuwinkeln die Winkelunschärfe verkleinern.

Da die Stoßparameter aus den Streuwinkeln berechnet werden (Gl. 3.4), ist einem Winkelintervall $\Delta\vartheta$ ein bestimmter Stoßparameterbereich Δb zugeordnet. Es ergibt sich, daß die resultierende relative Unschärfe der Stoßparameterangaben $\Delta b/b$ etwa gleich $\Delta\vartheta/\vartheta$ ist.

Bei der Berechnung der Anregungswahrscheinlichkeit \bar{P} geht der differentielle Streuquerschnitt σ für den Streuwinkel ϑ ein (Gl. 3.6a). Wir nehmen dazu den Wert, der sich für den mittleren Streuwinkel ergibt. Das bedeutet, daß man σ im erfaßten Winkelintervall als konstant annimmt (s. Abb. 9). In Wirklichkeit fällt aber der Wirkungsquerschnitt im Bereich $\Delta\vartheta$ ab. Das Verhältnis der Flächen unter der gestrichelten und der durchgezogenen Linie in Abb. 9 gibt damit annähernd den Fehler an, mit dem \bar{P} auf Grund der Annahme eines im Intervall $\Delta\vartheta$ konstanten Wirkungsquerschnitts behaftet ist.

Es ergibt sich allgemein, daß durch die Annahme $\sigma = \sigma(\vartheta) = \text{const.}$ im Winkelintervall $\Delta\vartheta$ der Wirkungsquerschnitt zu niedrig angesetzt wird. Die resultierenden Abweichungen sind in der Größenordnung von einigen Prozent und betragen im Durchschnitt etwa 3% bei allen im Experiment eingestellten Winkeln. In Abschnitt 5.1 werden die Auswirkungen dieses Effektes auf die $\bar{P}(b)$ - Kurve näher diskutiert.

4.3 Meßelektronik und Datenaufnahme

Das Blockschaltbild der in diesen Untersuchungen verwendeten

Meßelektronik ist in Abb. 10 dargestellt. Die Signale der Oberflächensperrschichtzähler, des Röntgenzählrohrs und des Sekundärelektronenvervielfachers am Elektronenspektrometer wurden in ladungsempfindlichen Vorverstärkern verstärkt, geformt und den entsprechenden Hauptverstärkern zugeführt. Im Röntgen- und Ionenzweig wurde das Zeitsignal vom Nulldurchgang des bipolaren Hauptverstärkerausgangs abgeleitet. Im Elektronenzweig wurde nach dem Filter-Hauptverstärker das Zeitsignal in einem constant-fraction-Diskriminator erzeugt. Dieser liefert ein von der Amplitude des Eingangssignals unabhängigen schnellen negativen Puls.

Die schnellen Zeitsignale liefern die Zeitmarken für die Koinzidenzmessung zwischen gestreuten Ionen und Röntgenquanten einerseits, sowie zwischen gestreuten Ionen und Augerelektronen andererseits. Die koinzidenten Ereignisse werden mit Hilfe eines Zeit-Amplitudenkonverters (ZAK) ermittelt. In der Regel sind die Zählraten im Elektronen- und im Röntgenzweig bedeutend niedriger als im Ionenzweig. Deshalb wurden die beiden ZAK mit diesen Signalen gestartet. Nach einem solchen Startimpuls läuft in dem ZAK für eine bestimmte Akzeptanzzeit eine Spannungsrampe hoch. Beim Eintreffen eines Stoppsignals aus dem Ionenzweig wird die Rampe angehalten; der ZAK liefert ein Ausgangssignal, dessen Amplitude proportional dem Zeitintervall zwischen Start- und Stoppsignal ist. Da der zeitliche Abstand zwischen nicht-koinzidenten Ereignissen unkorreliert ist, liefern diese im Pulshöhenspektrum des ZAK einen horizontalen Untergrund. Für echt koinzidente Ereignisse besteht eine feste Zeitrelation. Sie lassen sich im ZAK-Spektrum als Peak über dem nichtkoinzidenten Untergrund erkennen. Durch Verzögerungsglieder in den einzelnen Zweigen können die Laufzeiten der Pulse so

eingestellt werden, daß die Zeitdifferenz für die echten Ereignisse innerhalb der Akzeptanzzeit der ZAK liegt. Mit dieser Methode lassen sich also echte von zufälligen Ereignissen zuverlässig trennen.

Kürzlich ist von Andersen et al.⁴⁷⁾ beobachtet worden, daß schnelle Intensitätsmodulationen des Ionenstrahls, die bei bestimmten Betriebszuständen der Ionenquelle auftraten, die Ergebnisse von Koinzidenzmessungen deutlich beeinflussen können.

Solche Strahlschwingungen verursachen im Zeit-Amplituden Konverter (ZAK) Strukturen im ansonsten konstanten, horizontalen Untergrund zufälliger Koinzidenzen und können so eine Erhöhung der Zählrate echter Koinzidenzen vortäuschen. Nach Bekanntwerden dieses Effektes haben wir an mehreren ZAK-Spektren mit einem χ^2 - Test überprüft, ob der Untergrund zufälliger Koinzidenzen bei verschiedenen Einteilungen in Unterabschnitte signifikante Abweichungen vom Mittelwert zeigte. Da keine derartigen Differenzen auftraten nehmen wir an, daß unsere Daten von solchen Strahlschwingungen nicht beeinflußt sind. Auch wurde bei allen Experimenten der Strahlstrom so eingestellt, daß das Verhältnis von echten N_K zu zufälligen Koinzidenzen N_r stets durch die Bedingung $N_K/N_r > 1$ festgelegt war; bei den meisten Meßpunkten war sogar $N_K/N_r > 2$. Wenn das Verhältnis von echten zu zufälligen Koinzidenzen so gut ist, kann man ohnehin nicht erwarten, daß derartige Instabilitäten des Ionenstrahls die Meßergebnisse merklich beeinflussen.

Mit den in Abschnitt 4.2.2 erwähnten Maßnahmen im Ionenzweig und mit der Einstellung kleinstmöglicher Impulsformungszeiten an den Hauptverstärkern konnte eine Koinzidenzauflösungszeit von etwa

40 nsec (FWHM) erreicht werden. Diese Auflösungszeit ist recht gut für Schwerionenexperimente in diesem Energiebereich, da die Signale im Ionenzweig sehr dicht über dem Rauschen liegen.

Die Zählraten in den einzelnen Zweigen wurden laufend überwacht und die Gesamtzahl aller Ereignisse zusammen mit der Anzahl der Impulse aus den ZAK auf Zählgeräten registriert.

Über Analog-Digital-Konverter und ein Camac-Interface-System wurden die Daten in einem pdp 11/20 Rechner-gesteuerten Datenerfassungssystem gesammelt. Das Steuerprogramm des Rechners ist so organisiert, daß es entweder die Pulshöhenanalyse von 5 unabhängigen Spektren erlaubt, oder auf drei Eingangskanälen Pulshöhenanalyse und auf den beiden anderen Kanälen multi channel scaling (MCS) erlaubt. In der MCS-Betriebsart werden die Ereignisse solange in einem Kanal des Vielkanalanalysators aufsummiert, bis ein vorwählbares Zeitintervall abgelaufen ist, oder ein externer Steuerimpuls eintrifft. Danach wird die Datenaufnahme im nächsten Kanal fortgesetzt.

Bei den vorliegenden Untersuchungen wurde das Elektronenspektrum über MCS aufgesammelt, und das Röntgenspektrum und die beiden ZAK-Spektren nach Pulshöhen analysiert. Die aufgenommenen Spektren können während der Messung direkt auf einem Bildschirm beobachtet und bei Meßunterbrechungen auf Magnetband abgespeichert werden.

Bei derartigen Meßaufbauten mit empfindlichen Impulsverstärkern muß man sehr darauf achten, keine Störimpulse aufzufangen. Dazu müssen alle Impulskabel sorgfältig abgeschirmt und Erdschleifen vermieden werden. Bis auf sehr seltene Fälle von Störeinkopplungen durch leistungsstarke, von Thyristoren gesteuerte Geräte in

Nachbarlabors konnte die Meßelektronik ohne äußere Störeinflüsse betrieben werden. Diese Störungen traten bereits dann auf, wenn noch kein Ionenstrahl durch die Apparatur geschossen wurde. Da sie synchron mit der Netzfrequenz erzeugt werden, sind sie sehr leicht zu erkennen.

In regelmäßigen Abständen von ca. 4 Stunden wurden bei den Experimenten auch Untergrundmessungen durchgeführt, bei denen der Strahl durch die Apparatur geschossen wurde, ohne daß der Gas-einlaß geöffnet war. Wegen der niedrigen Zählraten in diesem Fall erhält man besonders übersichtliche Auskunft über äußere Störungen. Auch kann man auf diese Art den Einfluß der Streuung am Restgas in der Apparatur auf die Meßergebnisse überprüfen.

5. Meßergebnisse und Diskussion der Resultate

Im folgenden Abschnitt sollen die Meßergebnisse mit existierenden theoretischen Modellen verglichen werden. Um die Übersicht zu erleichtern, wird die Diskussion in drei Gruppen unterteilt:

- Stoßparameterabhängigkeit des $2p\pi - 2p\sigma$ Überganges. (Abschnitt 5.1)
- Stoßparameterabhängigkeit der K-Schalenanregung in Systemen, bei denen die $2p\pi - 2p\sigma$ - Kopplung unterdrückt ist, weil das $2p\pi$ - Orbital vor dem Stoß besetzt ist. (Abschnitt 5.2)
- Bestimmung der Stoßparameterabhängigkeit der Fluoreszenzausbeute ω_K aus gleichzeitiger Messung von Ion - Photon - bzw. Ion-Augererelektronenkoinzidenzen. (Abschnitt 5.3.)

Da die Theorie der K-Schalenanregung nach dem Elektronenpromotionsmodell sowohl für symmetrische (s.2.2.1) als auch für asymmetrische (s.2.2.2) Stoßsysteme entwickelt worden ist, wurden im Rahmen dieser Arbeit die in der nachstehenden Tabelle aufgeführten Stoßsysteme untersucht.

asymmetrische Stoßsysteme		symmetrische Stoßsysteme	
System	Energie [keV]	System	Energie [keV]
$\text{Ne}^+ - \text{O}_2$	250	$\text{Ne}^+ - \text{Ne}$	363
$\text{Ne}^+ - \text{O}_2$	385	$\text{O}^+ - \text{O}_2$	400
$\text{O}^+ - \text{Ne}$	308	$\text{N}^+ - \text{N}_2^{**})$	400
$\text{Na}^+ - \text{Ne}^*)$	420		
$\text{Mg}^+ - \text{Ne}$	380		

Tab. 2 Untersuchte Stoßsysteme und Projektilenergien

*) Nur Ion-Photon Koinzidenzmessung

**) Nur Ion-Augererelektron Koinzidenzmessung

5.1 Stoßparameterabhängigkeit des $2p\pi - 2p\sigma$ Überganges

Wegen der geringen Fluoreszenzausbeute ω_K in den hier untersuchten Elementen mit $Z \approx 10$ erhält man bereits durch Messung der Augerelektronen allein Auskunft über die Anregungswahrscheinlichkeit der K-Schale. Resultate, die über die Bestimmung der Augerelektronen-Emission gewonnen werden, sind daher praktisch frei von Einflüssen, die aus der etwaigen Änderung von ω_K resultieren können. So ist es z.B. bekannt, daß sich die Fluoreszenzausbeute mit der Energie ändert⁴²⁾. Es ist daher sinnvoll, die Anregungswahrscheinlichkeit der K-Schale an Hand der Ergebnisse der Ion-Augerelektronen Koinzidenzmessungen zu diskutieren.

Abb. 11 zeigt das Resultat für die Messung $Ne^+ - O_2$ bei 250 keV. Auf den Abszissen sind die Stoßparameter b in atomaren Einheiten ($1 \text{ a. u.} = 0,53 \text{ \AA}$), sowie der Laborstreuwinkel ϑ eingezeichnet. Auf der Ordinate ist die Wahrscheinlichkeit aufgetragen, daß ein Loch in dem $2p\pi$ - Unterniveau, das mit dem $2p\sigma$ - Orbital koppelt, in die K-Schale des leichteren Stoßpartners (hier: Sauerstoff) übergeht. Aus den von Briggs⁴³⁾ mit einer 4-Zustandsnäherung (vergl. Abschnitt 2.2.2) berechneten theoretischen Anregungswahrscheinlichkeit $P(b)$ wurde nach Gl. (3.7) das auf den Rückstoß korrigierte \bar{P} errechnet (durchgezogene Kurve). Die angetragenen Fehlerbalken geben den statistischen Fehler der experimentellen Werte an.

Die experimentellen Daten sind bei mittlerem Stoßparameter (hier: $b = 0,085 \text{ a.u.}$) an die theoretische Kurve angepaßt. Dadurch ergibt sich gleichzeitig eine Anpassung der totalen Wirkungsquerschnitte, da diese nach Gl. 3.8 vor allem durch die Anregungswahrscheinlichkeit bei mittleren und großen Stoßparametern bestimmt

wird. Es ist bekannt, daß der totale experimentelle Wirkungsquerschnitt gut durch die Theorie wiedergegeben wird.¹⁵⁾ Deshalb erscheint eine Anpassung sinnvoll, wie sie hier vorgenommen wird.

Eine Schwierigkeit ist dabei jedoch zu berücksichtigen: Der totale Wirkungsquerschnitt ist natürlich abhängig von der Zahl der Löcher N_{π} im $2p\pi$ - Niveau. Da, wie experimentell gezeigt wurde,⁴⁵⁾ N_{π} von der Relativgeschwindigkeit der Stoßpartner abhängt, kann dieser Wert nicht durch rein statistische Überlegung bestimmt werden. Beim Vergleich zwischen Theorie und Experiment bleibt N_{π} auch bei Absolutmessung somit als freier Parameter, da es noch keine Möglichkeit gibt, N_{π} ab initio zu berechnen.

Insgesamt geben die experimentellen Daten den Verlauf der theoretischen Kurve recht gut wieder. Vor allem wird der steile Anstieg bei kleinen Stoßparametern, der von der schnellen Rotation der Kernverbindungsline bei derartig nahen Stößen¹⁴⁾ herrührt (kinematisches Maximum), gut reproduziert.

Bereits in den früheren Messungen mit Ion-Röntgenquant-Koinzidenzen haben Sackmann et al.¹³⁾ für das $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$ Stoßsystem gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment gefunden. Da nun auch die Möglichkeit der Messung von Ion-Augerelektron-Koinzidenzen bestand, haben wir die Messung $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$ bei 363 keV wiederholt und die gleiche gute Übereinstimmung mit der Theorie bei gleichzeitiger Messung von Ion-Elektron- und Ion-Röntgen-Koinzidenzen gefunden (Abb. 12).

Auch bei der höheren Energie von 385 keV im $\text{Ne}^+ - \text{O}_2$ System zeigen die experimentellen Daten im wesentlichen den Verlauf, wie er von der Theorie vorhergesagt wird. Allerdings geben die Daten nicht das

Tal zwischen kinematischem und adiabatischem Maximum wieder (Abb.13a). Um auszuschließen, daß die molekulare Struktur des Targets für dieses Auffüllen des Tales verantwortlich ist, haben wir auch das $O^+ - Ne$ System bei 308 keV untersucht (Abb. 13b). In beiden Experimenten haben die Stoßpartner die gleiche Relativgeschwindigkeit. Im Rahmen der angegebenen Fehler ist ein Einfluß der molekularen Struktur des Target auf die Meßergebnisse nicht erkennbar. Auch bei $O^+ - Ne$ weichen die experimentellen Daten im Bereich des Tales zwischen kinematischem und adiabatischem Maximum vom theoretisch berechneten Verlauf ab.

Da sich im $O^+ - Ne$ System vor dem Stoß kein Loch im $2p$ - Niveau des schweren Stoßpartners befindet, ist im Rahmen des Elektronenpromotionsmodells die Anregung der K-Schale des leichten Stoßpartners eigentlich nicht möglich. In Abschnitt 2.2.3 ist jedoch bereits diskutiert worden, daß durch dynamische Effekte im einlaufenden Teil der Kerntrajektorie Löcher im $2p\pi$ - MO erzeugt werden können.⁶⁷⁾ Diese Leerstellen werden dann im weiteren Verlauf des Stoßes über $2p\pi - 2p\sigma$ - Kopplung in die K-Schale des leichten Stoßpartners transferiert. Messungen der totalen Wirkungsquerschnitte an den Systemen $Ne^+ - O_2$ und $O^+ - Ne$ zeigen, daß die Erzeugung von Löchern im $2p\pi$ - Niveau beim $O^+ - Ne$ System sehr effektiv sein muß, da die Wirkungsquerschnitte für die Anregung der K-Schale des Sauerstoffs bei $v_A = 0,8775$ a.u. im $Ne^+ - O_2$ System nur um etwa einen Faktor 1,6 über denen im $O^+ - Ne$ System liegen.⁴⁶⁾

Wenn man die Relativgeschwindigkeit (in reduzierten Einheiten r.u. (s.Gl. 2.14)) zwischen Geschoß und Targetatom weiter steigert, indem man zu höheren Energien oder zu leichteren Stoßsystemen übergeht, so sagt die Theorie eine weitere Trennung des kinematischen und des

adiabatischen Maximum voraus. Das steile kinematische Maximum verschiebt sich zu kleineren Stoßparametern und wird schmaler. Das breite adiabatische Maximum wandert zu größeren Stoßparametern.^{14, 16)} Durch diese beiden Effekte wird das Tal zwischen den Maxima sehr viel deutlicher ausgeprägt.

Wir haben deshalb bei der uns möglichen Maximalenergie von 400 keV die beiden Stoßsysteme $O^+ - O_2$ und $N^+ - N_2$ untersucht. In diesen Stößen wird von der Theorie ein sehr deutliches Tal vorausgesagt.

Abb. 14 und Abb. 15 zeigen, daß auch in diesen beiden Fällen das Tal zwischen kinematischem und adiabatischem Maximum von den experimentellen Werten deutlich aufgefüllt wird. Besonders eindrucksvoll ist dieses Verhalten bei der 400 keV $N^+ - N_2$ Messung zu beobachten. Aus Abbildung 15 ersieht man, daß im Verlauf der experimentellen Daten ein Tal nur ganz schwach angedeutet wird, das aber keinesfalls, auch bei Berücksichtigung der statistischen Fehler, das sehr deutlich ausgeprägte Tal der theoretischen Kurve wiedergibt.

Mögliche Gründe für die systematische Abweichung zwischen Theorie und Experiment im Bereich des Tales zwischen kinematischem und adiabatischem Maximum werden im folgenden diskutiert.

Zunächst soll untersucht werden, ob das Vorgehen bei der Datenaufnahme und der Auswertung zu der aufgezeigten Abweichung führen kann.

i) Der Einfluß der experimentellen Winkelunschärfe auf die Berechnung von $\sigma(\vartheta)$ ist bereits in Abschnitt 4.2.5 erläutert worden.

Nimmt man an, daß das nach Gl.3.7 errechnete theoretische $\bar{P}(b)$ den

Verlauf der Anregungswahrscheinlichkeit im Winkelintervall richtig wiedergibt, so muß der Verlauf von $\sigma(\nu_{\alpha\beta})$ (Abb.9) mit diesem \bar{P} gewichtet werden. Nach dem in 4.2.5 dargelegten Verfahren wird ein neues \bar{P}^* ermittelt. Der Vergleich dieses \bar{P}^* mit den experimentellen Daten erfolgt nach der üblichen Normierung bei mittleren Stoßparametern. Am Beispiel des 400 keV $N^+ - N_2$ Experimentes wurde so für jeden zweiten Datenpunkt \bar{P}^* berechnet. \bar{P}^* ist in allen Fällen etwas (maximal 5%) größer als \bar{P} . Der Vergleich der \bar{P}^* -Kurve mit den experimentellen Punkten ergibt, daß sich die Lage der Daten jeweils bezogen auf die \bar{P} - und \bar{P}^* - Kurve um höchstens 2% verschiebt. Derartige Abweichungen sind aber weit innerhalb der statistischen Fehler.

ii) Wichtig für die Genauigkeit des Experimentes ist vor allem die Justierung des Zähler-Blendensystems zum Nachweis der Ionen bezüglich der Achse des Ionenstrahls, da davon die Genauigkeit des eingestellten Streuwinkels abhängt. Mehrfache optische Überprüfungen haben ergeben, daß die Justierung innerhalb der in Abschnitt 4.2.2 angegebenen Toleranz sehr stabil ist.

iii) Die Möglichkeit der Verfälschung von Meßdaten durch schnelle Intensitätsmodulation des Ionenstrahls, die von Andersen et al.⁴⁷⁾ beobachtet wurden, ist in Abschnitt 4.3 diskutiert worden. Auch in den hier durchgeführten Messungen konnte dieser Effekt nicht beobachtet werden.

iv) Die Intensitätsverteilung der Elektronen, die von der Zerfallskinematik bei Aussendung eines Augerelektrons herrührt und die bei einer bestimmten Konstellation des experimentellen Aufbaus die Lage der Datenpunkte geringfügig beeinflussen kann, wird

ausführlich im Anhang diskutiert. Bei den hier erörterten Messungen hat dieser Effekt keine Bedeutung (vgl. Anhang).

v) Das Streupotential ist für die Berechnung von $P(b)$ von besonderer Bedeutung, da es sowohl die Kerntrajektorien, wie auch die differentiellen Streuquerschnitte bestimmt. Da in der Theorie und bei der Auswertung des Experimentes das gleiche exponentiell abgeschirmte Coulombpotential (Gl.3.5) verwendet wird, sind Abweichungen daher nicht erklärbar. Allerdings werden die differentiellen Streuquerschnitte nur bei der Auswertung der experimentellen Daten (Gl.3.6) und nicht in der Theorie benötigt. Bei Kontrollrechnungen, in denen statt des Bohr-Potentials (Gl.3.5) ein Thomas-Fermi-Potential verwendet wurde, zeigte sich, daß die berechneten Stoßparameter und Streuquerschnitte gegenüber der genauen Form des Potentials recht unempfindlich sind. Erst in Bereichen größerer Kernabstände (beim Abfall des adiabatischen Maximums bei großen Stoßparametern) kommen die Abweichungen der mit Bohr- und Thomas-Fermi-Potential berechneten Werte in die Größenordnung von einigen Prozent. Im 400 keV $N^+ - N_2$ Experiment ergaben sich die größten Unterschiede bei $\chi = 0,97^\circ$ mit $\Delta b/b = 2\%$ und $\Delta \sigma(\chi)/\sigma(\chi) = 4\%$.

Wenn somit Einflüsse experimenteller Ungenauigkeiten auf die Daten ausgeschlossen werden können, so muß man in Betracht ziehen, daß das theoretische Modell die K-Schalenanregungswahrscheinlichkeit nicht korrekt wiedergibt.

Der Transfer von Doppellöchern⁴⁹⁾ in die K-Schale über $2p\pi - 2p\sigma$ - Kopplung könnte zum Ausfüllen des Tales zwischen kinematischem und adiabatischem Maximum beitragen, wenn er bei der Berechnung von \bar{P} berücksichtigt wird. Wegen der höheren Emissionsenergie

kann der Zerfall des ersten K-schalenloches in diesem Experiment nicht registriert werden. Für Neon erhöht sich z.B. die Elektronenenergie um etwa 200 eV für Emission aus Zuständen mit zwei K-Schalenlöchern⁷⁵⁾. Gleichung 6 aus Ref. 49 gibt an, wie man für gegebene Wahrscheinlichkeit für die Existenz eines Loches p_1 und zweier Löcher p_2 im $2p\pi$ - MO vor dem Stoß, die resultierende Anregungswahrscheinlichkeit berechnet. Daraus kann man abschätzen, daß die tiefste Stelle des Tales relativ zum adiabatischen Maximum durch Doppellochtransfer um höchstens 10% angehoben werden kann.⁴³⁾ Da in dieser Überlegung für die Anwesenheit von Doppelöchern im $2p\pi$ - MO und deren Transfer die günstigsten Annahmen gemacht werden ($p_2 = 1$; $p_1 = 0$), ist es aus statistischen Gründen sehr unwahrscheinlich, daß $\bar{P}(b)$ von diesem Effekt merklich beeinflusst wird. Für das $N^+ - N_2$ System bei 400 keV ist das Verhältnis von adiabatischem Maximum zur tiefsten Stelle des Tales $0,55/0,2 = 2,75$ (vgl. Abb. 15). Berechnet man mit $p_2 = 1$ und $p_1 = 0$ eine neue theoretische Kurve,⁴⁹⁾ so ergibt sich für diese $0,474/0,19 = 2,50$; also nur ein schwaches Auffüllen des Tales.

Wie schon erwähnt werden in dieser Arbeit die experimentellen Daten mit Zwei- bzw. Vierzustandsnäherungen (Ne-O) verglichen. Aus diesem Vergleich folgt, daß diese Näherungen offenbar nicht in allen Stoßparameterbereichen hinreichend genau sind, da vor allem Kopplungen an höher liegende Niveaus vernachlässigt werden. Im Augenblick scheint eine Berücksichtigung solch zusätzlicher Kopplungen in den Rechnungen sehr schwierig zu sein, auch wenn man nur die Wechselwirkung der $2p\pi$ - und $2p\sigma$ - MO mit den nächst höherliegenden Orbitalen betrachtet, die mit der M-Schale des vereinigten Atoms korrelieren (vgl. Abb.1).⁴⁸⁾

Eine endgültige Deutung für die Abweichung von Experiment und Theorie im Bereich des Tales zwischen adiabatischem und kinematischem Maximum läßt sich daher zum jetzigen Zeitpunkt noch nicht geben.

5.2 Stoßparameterabhängigkeit in Systemen ohne $2p\pi$ - Loch vor dem Stoß

Damit die K-Schale über den Prozeß der $2p\pi$ - $2p\sigma$ - Rotationskopplung angeregt werden kann, ist es natürlich notwendig, daß sich vor dem Bereich der $2p\pi$ - $2p\sigma$ Kopplung ($R \approx 0$) ein Loch im $2p\pi$ - MO befindet. In Abschnitt 2.2.3 ist bereits diskutiert worden, daß durch langreichweitige Wechselwirkungen im einlaufenden Teil der Kerntrajektorie $2p\pi$ - Löcher erzeugt werden können.

Im O^+ -Ne System ist dieser Prozeß offenbar sehr effektiv (vgl. Diskussion in Abschnitt 5.1). Da die K-Schale des leichteren Stoßpartners mit dem 2p-Niveau des schweren Stoßpartners korreliert, ist bei höherem Z des schweren Stoßpartners wegen der stärkeren Bindung die Bildung eines 2p-Loches erschwert. Das bedeutet, daß der totale Wirkungsquerschnitt für K-Anregung mit wachsendem Z abfallen muß, wenn die Ionisation der K-Schale hauptsächlich über $2p\pi$ - $2p\sigma$ - Kopplung erfolgt.

Abb. 16 zeigt Messungen der Energieabhängigkeit des totalen Wirkungsquerschnitts der Neon-K-Anregung für die Systeme Ne^+ -Ne, Na^+ -Ne und Mg^+ -Ne. Wie erwartet fällt der Wirkungsquerschnitt für wachsende Z des schwereren Stoßpartners stark ab. So ist z.B. $\sigma(Ne^+-Ne)/\sigma(Mg^+-Ne) \approx 10$. Da demnach die $2p\pi$ - $2p\sigma$ - Kopplung in den Stoßsystemen Na^+ -Ne und Mg^+ -Ne unterdrückt ist, kann man darüberhinaus erwarten, daß zusätzliche Prozesse, die möglicher-

weise zur K-Anregung beitragen und nicht von einem $2p\pi$ -Loch abhängen, in diesen Stoßsystemen beobachtbar sein sollten.

Wir haben deshalb auch für diese Systeme die Stoßparameterabhängigkeit der K-Schalenanregung untersucht. In Abb. 17a ($\text{Na}^+ - \text{Ne}$) erkennt man, daß im Vergleich mit der Theorie die experimentellen Daten bei kleinen Stoßparametern etwas steiler ansteigen. Deutlicher ist dieses Verhalten im System $\text{Mg}^+ - \text{Ne}$ bei 380 keV (Abb. 17b).

Es sei darauf hingewiesen, daß die $\text{Na}^+ - \text{Ne}$ Daten aus Röntgen-Ion Koinzidenzmessungen stammen, im Gegensatz zu den bisher dargestellten Elektron-Ion Koinzidenzmessungen. Gleichzeitige Messungen von Röntgenquant-Ion und Augerelektron-Ion Koinzidenzen in 363 keV $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$ und 380 keV $\text{Mg}^+ - \text{Ne}$ liefern jedoch die gleiche Stoßparameterabhängigkeit für beide Zerfallsarten. Es scheint daher vernünftig, wenn man annimmt, daß auch die $\text{Na}^+ - \text{Ne}$ Daten repräsentativ sind für die K-Schalenanregungswahrscheinlichkeit in diesem System.

Die Meßergebnisse weisen darauf hin, daß bei kleinen Stoßparametern neben der $2p\pi - 2p\sigma$ Kopplung noch ein zusätzlicher Mechanismus wirkt, der die Anregungswahrscheinlichkeit erhöht. Diese Resultate werden von Messungen der Stoßparameterabhängigkeit der K-Anregung am Ar-Ar System unterstützt.⁷⁰⁾ In diesem Fall ist die Bindungsenergie der L-Schale noch beträchtlich höher als in den hier untersuchten Stoßsystemen. Wie zu erwarten, ist deshalb auch der Unterschied zwischen den Messungen und der auf der $2p\pi - 2p\sigma$ Kopplung basierenden Rechnung weit deutlicher ausgeprägt. Insbesondere bei 4,5 MeV Ar-Ar ($v = 0,17$ r.u.) liegen die experimentellen Werte bei sehr kleinen Stoßparametern um etwa einen Faktor 4 über den Rechnungen.^{50,70)}

Eine Erklärung für dieses starke Anwachsen der Anregungswahrscheinlichkeit bei kleinen Stoßparametern ist vor allem die Möglichkeit der direkten Kopplung des $2p\pi$ - MO an höher liegende unbesetzte (Kontinuums-) Zustände. Anregung aus dem $1s\sigma$ - Niveau, die in Mg-Ne Stößen zu Emission von Mg K-Strahlung führt, konnte nicht beobachtet werden; aus dem Energiespektrum der koinzidenten Röntgenquanten beim Streuwinkel $\vartheta = 27^\circ$ konnte abgeschätzt werden, daß $\sigma_K(\text{Mg})/\sigma_K(\text{Ne}) < 1\%$ in diesem Experiment ist.

Der Verlauf der experimentellen Daten (Abb. 17b) läßt sich dadurch deuten, daß hier zwei konkurrierende Prozesse zur Anregung der Neon K-Schale beitragen. Diese sind: wie bisher diskutiert i) $2p\pi$ - $2p\sigma$ Kopplung, die nach Erzeugung eines $2p\pi$ - Loches im Eingangskanal ablaufen kann; ii) entweder direkte Anregung des $2p\sigma$ - MO bei kleinen Stoßparametern, oder z.B. Kopplung zwischen $2p\pi$ und höheren Niveaus bei kleinem b , die eine Stoßparameterabhängigkeit von N_π bewirkt.

Im $\text{Mg}^+ - \text{Ne}$ Experiment bei 390 KeV wird der totale Wirkungsquerschnitt hauptsächlich durch den Prozeß i bestimmt, da bei mittleren und großen Stoßparametern die experimentellen Daten gut mit dem nach der $2p\pi$ - $2p\sigma$ - Kopplung berechneten Verlauf übereinstimmen. Am Ar-Ar System ist gezeigt worden,⁷⁰⁾ daß der Prozeß ii mit abnehmender Einschußenergie in schwereren Systemen für die K-Anregung dominant wird. Darauf ist möglicherweise auch das Abbiegen der $\ln N_\pi(v_A)$ -Kurve zu höheren Werten bei $\alpha/v_A \gtrsim 8$ zurückzuführen. (s. Abschnitt 2.2.3). In Abb. 18 sind die experimentell bestimmten Werte $\sigma_{\text{tot}}^K / \sigma_{\text{tot}}^{\text{rot}}$ für $\text{Na}^+ - \text{Ne}$ und $\text{Mg}^+ - \text{Ne}$ Stöße mit der Kurve $\ln N_\pi(v_A)$ aufgetragen gegen α/v_A aus Ref. 71 verglichen. In der Lage stimmen die Werte etwa mit dem Verlauf der $\text{Ne}^0 - \text{Ne}$ Daten⁷¹⁾

überein. Für die hier diskutierten schwach asymmetrischen Systeme ohne Loch im $2p\pi$ - MO vor dem Stoß liegen keine totalen Anregungsquerschnitte für größere v_A vor. Deshalb ist es nicht sicher, ob der Verlauf von $\sigma_{tot}^k / \sigma_{tot}^{rot}$ für diese Systeme bei kleinem α/v_A mit demjenigen für die symmetrischen Systeme⁷¹⁾ übereinstimmt.

Keine der bestehenden Theorien für die Anregung innerer Schalen ($2p\pi$ - $2p\sigma$ Kopplung;¹⁶⁾ statistisches Modell;⁵²⁾ "Coulombanregung"^{4), 51)}) ist in der Lage den Verlauf von $P(b)$ bei kleinen Stoßparametern zu beschreiben.⁷⁰⁾ Der steile Anstieg bei kleinen b deutet aber darauf hin, daß hier Rotationskopplungen zwischen dem $2p\sigma$ - MO und unbesetzten höher liegenden Zuständen wirksam werden, die ja vor allem bei großen Streuwinkeln besonders effektiv sind.

5.3 Stoßparameterabhängigkeit der Fluoreszenzausbeute ω_K

In den hier untersuchten Systemen erfolgt die Auffüllung eines K-Schalenloches mit sehr hoher Wahrscheinlichkeit über einen Auger-Prozeß. Da die K-Schalen Fluoreszenzausbeute ω_K hier nur sehr klein ist (höchstens einige Prozent) macht sich z.B. eine Verdopplung von ω_K in der Ausbeute an Röntgenquanten entsprechend bemerkbar, während die Augerelektronenausbeute davon praktisch nicht beeinflußt wird. Deshalb ist bei Messung von Röntgen-Ion Koinzidenzen allein eine Fehlinterpretation von $\bar{P}_x(b)$ möglich. Durch gleichzeitige Messung der Emission von Röntgenquanten und Augerelektronen in Koinzidenz mit gestreuten Ionen kann man jedoch feststellen, ob sich die Fluoreszenzausbeute ω_K mit dem Stoßparameter ändert.

Auf den ersten Blick scheint eine Stoßparameterabhängigkeit von ω_K unwahrscheinlich, da ω_K überwiegend von der Elektronenkonfiguration in der L-Schale bestimmt wird.⁵³⁾ Die K-Schalenanregung in den hier untersuchten Systemen findet bei Stoßparametern statt, die kleiner sind als der K-Schalenradius. Daher könnte man vermuten, daß sich über einen derartig engen Stoßparameterbereich ($b \ll$ Radius der L-Schale) die Konfiguration der L-Schalenelektronen nicht ändert.

Für das $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$ System (Abb. 12) findet man, übereinstimmend mit den gerade angegebenen Argumenten, keine Änderung der Fluoreszenzausbeute mit dem Stoßparameter. Daß diese vereinfachten Annahmen aber nicht für alle Stoßsysteme gelten, erkennt man in Abb. 19, wo die Daten für die 385 keV $\text{Ne}^+ - \text{O}_2$ Stöße aufgetragen sind. Bei kleinen Stoßparametern steigt die Wahrscheinlichkeit für Röntgenemission wesentlich stärker an als die entsprechenden Augerelektronendaten. Diese Messung gibt erstmalig einen Hinweis darauf, daß sich ω_K mit dem Stoßparameter ändern kann.

In diesem Fall muß man untersuchen, ob die molekulare Struktur des Targets die experimentellen Ergebnisse beeinflussen kann. Eine eindeutige Klärung könnte eine Messung an einem atomaren Sauerstofftarget bringen. Da ein derartiges Target nicht zu Verfügung stand, haben wir Vergleichsmessungen durchgeführt, bei denen der Sauerstoff im Targetgas in verschiedener molekularer Struktur vorlag. Es erweist sich, daß sich die differentiellen Anregungswahrscheinlichkeiten für O_2 - und H_2O - Targets nicht unterscheiden (Abb. 20). Darüber hinaus haben wir auch das inverse System $\text{O}^+ - \text{Ne}$ bei 308 keV untersucht (vgl. Bemerkungen zu diesem System in Abschnitt 5.1). Diese Primärenenergie entspricht der

gleichen Relativgeschwindigkeit wie im $\text{Ne}^+ - \text{O}_2$ System bei 385 keV. Abb. 21 zeigt, daß auch hier die Röntgendaten bei kleinen Stoßparametern deutlich höher liegen, aber die Abweichung von den Augerelektronendaten und den theoretischen Rechnungen ist nicht so stark wie im inversen System. Natürlich scheiden im $\text{O}^+ - \text{Ne}$ Stoß die oben erwähnten molekularen Effekte völlig aus, aber das muß nicht der Grund für den beobachteten Unterschied sein. Der Ausdruck "inverses System" kann nämlich nicht im strengen Sinne angewandt werden, da die Elektronenkonfiguration vor dem Stoß nicht vollkommen übereinstimmt. Aus theoretischen Rechnungen ist bekannt, daß auch leichte Änderungen der Elektronenkonfiguration in der L-Schale erhebliche Schwankungen der Fluoreszenzausbeute ω_K bewirken können.⁵³⁾ Außerdem muß im $\text{O}^+ - \text{Ne}$ System zunächst ein Loch im $2p\pi - \text{MO}$ erzeugt werden, bevor die $2p\pi - 2p\sigma$ Kopplung bei nahen Stößen wirksam werden kann. Auch dies kann unter Umständen Einfluß auf die Konfiguration der Elektronen in der L-Schale des Sauerstoffs haben.

Man könnte vermuten, daß der steile Anstieg der Röntgendaten durch die Produktion von Röntgenquanten verursacht wird, die von rückgestreuten Targetteilchen an den Kammerwänden ausgelöst werden. Da die Targetkammer aber innen mit Graphit besprüht ist (vgl. Abschnitt 4.2.1), sollte die entstehende Strahlung so niederenergetisch sein, daß sie mit Diskriminatoren abgeschnitten werden kann.

Allerdings können rückgestreute Atome auch direkt auf die Zählrohrfolien (vgl. Abb.6 und Abschnitt 4.2.3) treffen und dort bei der Abbremsung ihre charakteristische Strahlung emittieren. Dies würde vor allem bei großen Streuwinkeln effektiv sein, da dann der

Impulsübertrag groß ist und damit auch die Energie der rückgestreuten Teilchen. Da sowohl streuendes wie gestreutes Teilchen in der Streuebene liegen, kann man allerdings die Zähleranordnung so wählen, daß die Stoßpartner nicht gleichzeitig auf Ionen- und Röntgendetektor fallen können. In diesem Experiment war eine derartige Anordnung gewählt.

Da der Einfluß eines solchen Effektes von der jeweiligen azimuthalen Position der Detektoren abhängen muß, haben wir in 385 keV $\text{Ne}^+ - \text{O}_2$ Stößen ($\nu_{\text{lab}} = 27^\circ$) die Zahl der echten Ion-Röntgenkoinzidenzen der einzelnen eingesetzten Ionenzähler verglichen. Es ergab sich keine signifikante Abweichung dieser Zahlen.

In den gleichzeitigen Koinzidenzmessungen mit Elektronen und Röntgenquanten an den anderen in dieser Arbeit untersuchten Systemen, konnte nahezu keine Stoßparameterabhängigkeit von ω_K beobachtet werden. Nur bei 400 keV $\text{O}^+ - \text{O}_2$ und 380 keV $\text{Mg}^+ - \text{Ne}$ scheint die Fluoreszenzausbeute beim kleinsten gemessenen Stoßparameter anzusteigen (Abb. 22). In dieser Abbildung ist das Verhältnis der Anregungswahrscheinlichkeiten für Röntgen- und Augerprozesse $\bar{P}_X / \bar{P}_{\text{Au}}$ gegen den Stoßparameter aufgetragen. Für konstantes ω_K sollte dieses Verhältnis konstant (willkürlich = 1) sein. Eine Ausnahme bildet nur das Neon-Sauerstoffsystem. Dies wird auch durch die Messungen bei der niedrigeren Energie von 250 keV unterstrichen. Auch hier weicht ω_K über einen breiten Stoßparameterbereich von seinem Mittelwert bei großen b ab. Da alle Vergleiche der experimentellen Daten mit der Theorie immer auf die totalen Wirkungsquerschnitte bezogen sind, weicht ω_K bei kleinem und nicht bei großem b vom erwarteten konstanten Verlauf ab.

Die Eigenart des Neon-Sauerstoffsystems bezüglich des Verlaufs von ω_K wird bekräftigt durch die Messungen $O^+ - O_2$ bei 400 keV. Obwohl in all diesen Fällen die K-Anregung am Sauerstoff beobachtet wird, ändert sich ω_K nur im Neon-Sauerstoffsystem deutlich. Daher kann man ausschließen, daß die Änderung der Fluoreszenzausbeute mit dem Stoßparameter etwa eine Eigenschaft des K-angeregten Sauerstoffes ist. Vielmehr treten diese Effekte in den hier gemessenen Systemen offensichtlich nur bei der Neon-Sauerstoffkombination auf.

Die K-Schalen Fluoreszenzausbeute hängt empfindlich von der Elektronenkonfiguration in der L-Schale vor dem Zerfall ab. So hat z.B. die Anzahl der L-Elektronen vor dem Stoß einen Einfluß auf die Größe von ω_K .

Z.B. für die Neon-K-Anregung ist gezeigt worden, daß ein funktionaler Zusammenhang besteht zwischen der mittleren Anzahl der Leerstellen \bar{n}_L in der L-Schale und der Fluoreszenzausbeute ω_K .⁵⁵⁾ \bar{n}_L wird dabei über die experimentell gemessene Schwerpunktsverschiebung des Augerelektronenspektrums bestimmt. Bislang sind diese empirischen Zusammenhänge nur für das gut untersuchte Neon durch verschiedene Messungen bestimmt. Jedoch beobachtet man beim Sauerstoff zumindest in Messungen der totalen Fluoreszenzausbeute, daß sich für Stöße mit doppelt geladenen Ionen höhere Werte ergeben als für Stöße mit einfach geladenen Primärionen (Abb.23). Bei doppelt geladenen Ionen ist vor dem Stoß bereits ein L-Elektron weniger vorhanden als bei einfach geladenen. Außerdem mag noch eine Rolle spielen, daß dadurch die Abschirmung geändert wird. Das bewirkt im Korrelationsdiagramm, daß sich vor allem die Lage der L-Schalenniveaus verschiebt,⁵⁴⁾ wodurch sich natürlich die

Übergangswahrscheinlichkeiten innerhalb der L-Schale ändern und unterschiedliche Elektronenkonfigurationen resultieren können.

Eine Möglichkeit, die L-Schalenkonfiguration eindeutig zu bestimmen, wäre die Messung der koinzidenten Augerelektronenspektren mit hoher Auflösung bei verschiedenen Streuwinkeln. Mann kann erwarten, daß die so bestimmten Spektren identifizierbare Linien zeigen, die zusammen mit entsprechenden theoretischen Berechnungen Aufschluß über die Elektronenkonfiguration geben. Allerdings ist hochauflösende Augerelektronenspektroskopie in Ion- Atomstößen wegen der Dopplerverbreiterung der Linien sehr schwierig.⁵⁶⁾

6. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden N^+ , O^+ , Ne^+ , Na^+ und Mg^+ - Ionen unter Einzelstoßbedingungen durch gasförmige N_2^- , O_2^- , H_2O^- - und Ne^- Targets geringer Dichte geschossen. Dabei wurde die Stoßparameterabhängigkeit der K-Schalenanregung durch gleichzeitige Koinzidenzmessung zwischen den in diesen Stößen emittierten Röntgenquanten bzw. Augerelektronen und den in Laborwinkeln zwischen $0,9^\circ$ und 36° gestreuten Ionen bestimmt. Diese gleichzeitigen Koinzidenzmessungen erbrachten erstmals auch Hinweise auf die Stoßparameterabhängigkeit der Fluoreszenzausbeute ω_K .

Es konnte gezeigt werden, daß bei niedrigen Energien ($v_A \leq 0,1$ r.u.) in leichten Stoßsystemen ($Z_A \leq 10$, $Z_B \leq 10$) mit einem Loch in der 2p-Schale vor dem Stoß die experimentellen Daten recht gut mit der Theorie von Taubjerg, Briggs und Vaaben¹⁶⁾ übereinstimmen. Bei höheren Energien sagt die Theorie ein deutlich ausgeprägtes Tal zwischen adiabatischem und kinematischem Maximum voraus, das von den experimentellen Daten nicht wiedergegeben wird.

Bei den schwereren Stoßsystemen ($Z_A > 10$), in denen vor der eigentlichen $2p\pi - 2p\sigma$ Kopplung nur geringe Wahrscheinlichkeit für ein $2p\pi$ -Loch besteht, steigen die experimentellen Daten bei kleinen Stoßparametern stärker an als von der Theorie vorhergesagt. Da in diesen Systemen die für die K-Anregung dominierende $2p\pi - 2p\sigma$ Rotationskopplung unterdrückt ist, wird vermutet, daß hier bei kleinen Stoßparametern noch ein zusätzlicher Mechanismus wirkt.

Eindeutige Erklärungen der beobachteten Stoßparameterabhängigkeit der Fluoreszenzausbeute ω_K oder der Abweichungen der gemessenen $P(b)$ -Werte von der Theorie der $2p\pi - 2p\sigma$ Rotationskopplung

sind zum jetzigen Zeitpunkt noch nicht möglich.

Es ist jedoch zu vermuten, daß das Ansteigen von ω_K bei kleinen Stoßparametern im Neon-Sauerstoffsystem auf Änderungen der Elektronenkonfiguration durch Rotationskopplungen in der L-Schale zurückzuführen ist. Experimentell könnten sich derartige Konfigurationsänderungen durch aufwendige, hochauflösende Messungen koinzidenter Augerelektronenspektren feststellen lassen.

Die Abweichung der gemessenen Daten von Theorie für die $2p\pi - 2p\sigma$ Kopplung im Bereich des Tales zwischen adiabatischem und kinematischem Maximum rühren vermutlich von einem Versagen dieser einfachen Zweizustandsnäherung her. Eine Berücksichtigung zusätzlicher, höher liegender Orbitale in den Rechnungen wird zur Zeit in Angriff genommen.⁴⁸⁾ Zusätzlich kann die theoretische Behandlung der Kopplung des $2p\sigma - MO$ an hochliegende (Kontinuums-) Zustände weitere Aufschlüsse geben. Für die Berechnung differentieller Anregungsquerschnitte müssen dabei allerdings eine realistische Kerntrajektorie und der energetische Verlauf des Molekülorbitals berücksichtigt werden. Erste Schritte in diese Richtung wurden von Thorson für die Anregung des $1s\sigma - MO$ im $H^+ - H$ System gemacht.⁵⁷⁾ Man kann hoffen, daß diese Näherungen mit mehr als zwei Zuständen die Diskrepanzen zwischen Theorie und Experiment verringern.

Die weiteren experimentellen Anstrengungen werden sich vor allem auf die in dieser Arbeit zu Tage getretenen Abweichungen von der einfachen Zweizustandsnäherung konzentrieren, die die K-Schalenanregung in leichten Stoßsystemen nur durch die $2p\pi - 2p\sigma$ Rotationskopplung beschreibt.

Literaturverzeichnis

- 1) J.D. Garcia, R.J. Fortner und T.M. Kavanagh
Rev. Mod. Phys. 45, 111 (1973)
- 2) Q. C. Kessel und B. Fastrup
Case Studies in Atomic Physics 3, 137 (1973)
- 3) E. Merzbacher und H.W. Lewis
Handbuch der Physik 34, 166 (1958) (Springer, Berlin)
- 4) J. Bang und J.M. Hansteen
Mat. Fys. Medd. 31, 13 (1959)
J.M. Hansteen und O.P. Mosebekk
Z. Phys. 234, 281 (1970)
- 5) J.D. Garcia
Phys. Rev. A1, 280 (1970)
- 6) H.J. Specht
Z. Phys. 185, 301 (1965)
- 7) U. Fano und W. Lichten
Phys. Rev. Lett. 14, 627 (1965)
W. Lichten
Phys. Rev. 164, 131 (1967)
- 8) V.V. Afrosimov, Yu.S. Gordeev, M.N. Panov
und N.V. Fedorenko
Sov. Phys.-Tech.Phys. 9, 1248 (1965)
E. Everhart und Q.C. Kessel
Phys. Rev. Lett. 14, 247 (1965)
Q.C. Kessel, A. Russek und E. Everhart
Phys. Rev. Lett. 14, 484 (1965)

- 9) C. Zener
Proc. Roy. Soc. A137, 696 (1932)
- 10) V.V. Afrosimov, Yu.S. Gordeev, A.M. Polyanski
und A.P. Shergin
JETP 30, 441 (1970)
- 11) B. Fastrup, G. Herrmann und K.J. Smith
Phys. Rev. A3, 1591 (1971)
- 12) H.J. Stein, H.O. Lutz, P.H. Mokler und P. Armbruster
Phys. Rev. A5, 2126 (1972)
H.J. Stein
KFA Jülich Report Nr. Jül-799-NP (1971)
- 13) S. Sackmann, H.O. Lutz und J.S. Briggs
Phys. Rev. Lett. 32, 805 (1974)
S. Sackmann
KFA Jülich Report Nr. Jül-1154 (1975)
- 14) J.S. Briggs und J. Macek
J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 5, 579 (1972)
- 15) K. Taulbjerg und J.S. Briggs
J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 8, 1895 (1975)
J.S. Briggs und K. Taulbjerg
J. Phys. B: Atom Mol. Phys. 8, 1909 (1975)
- 16) K. Taulbjerg, J.S. Briggs und J. Vaaben
J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 9, 1351 (1976)
- 17) M. Barat und W. Lichten
Phys. Rev. A6, 211 (1972)

- 18) N.F. Mott und H.S.W. Massey
The Theory of Atomic Collisions, Oxford U.P.,
London, 3. Auflage (1965)
- 19) R.K. Cacak und T. Jorgensen Jr.
Phys. Rev. A2, 1322 (1970)
R.K. Cacak, Q.C. Kessel und M.F. Rudd
Phys. Rev. A2, 1327 (1970)
- 20) F.W. Saris und D. Onderdelinden
Physica 49, 441 (1970)
- 21) D.R. Bates und A.D. Williams
Proc. Phys. Soc. 83, 425 (1964)
- 22) N. Stolterfoht, P. Ziem und D. Ridder
J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 7, L409 (1974)
- 23) T.A. Green
Proc. Phys. Soc. 86, 1017 (1965)
- 24) A. Russek
Phys. Rev. A4, 1918 (1971)
- 25) D.R. Bates und R. McCarroll
Proc. Roy. Soc. A245, 175 (1958)
- 26) S.B. Schneiderman und A. Russek
Phys. Rev. 181, 311 (1969)
- 27) K. Taulbjerg, J. Vaaben und B. Fastrup
Phys. Rev. A12, 2325 (1975)

- 28) D.R. Bates und D. Sprevak
J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 4, L47 (1971)
- 29) S.K. Knudson und W.R. Thorson
Can. J. Phys. 48, 313 (1970)
- 30) F.P. Larkins
J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 5, 571 (1972)
- 31) D.R. Bates, K. Ledsham und A.L. Stewart
Phil. Trans. Roy. Soc. 246, 215 (1953)
- 32) J.S. Briggs und M.R. Hayns
J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 6, 514 (1973)
- 33) P. Marmier
Kernphysik Bd. I und II, VMP ETH Zürich,
4. Auflage (1968)
- 34) L.D. Landau und E.M. Lifschitz
Lehrbuch der theoretischen Physik, Bd. I,
Akademie Verlag Berlin, 5. Auflage (1967)
- 35) F.W. Bingham
SG-RR-66-506, Nucl. Sc. Abstr. 20: 46296 (1966)
- 36) U. Scharfer
Universität Köln, private Mitteilung
- 37) Brunswick Corporation, "Collimated Hole Structures",
Development Report, Technical Products Division,
Chicago

- 38) Ortec Inc., "Silicon Surface Barrier Radiation Detectors",
Instruction Manual, Oak Ridge
- 39) K.D. Sevier
Low Energy Electron Spectrometry,
Wiley Interscience, New York
- 40) H.D. Polaschegg
Appl. Phys. 4, 63 (1974)
- 41) N. Stolterfoht
HMI Report Nr. HMI-B 104 (1971)
- 42) N. Stolterfoht, D. Schneider und D. Burch
Proc. 4th Int. Conf. on Atom. Phys., Abstracts of
Contributed Papers, Heidelberg 1974, S. 643
- 43) J.S. Briggs
AERE Harwell, private Mitteilung
- 44) N. Luz, S. Sackmann und H.O. Lutz
J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 9, L15 (1976)
- 45) B. Fastrup, E. Bøving, G.A. Larsen und P. Dahl
J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 7, L206 (1974)
- 46) R. Hippler
Universität Bielefeld, private Mitteilung
- 47) J.U. Andersen, L. Kocbach, E. Laesgaard und M. Lund
und C.D. Moak
J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 9, 3247 (1976)

- 48) K. Taulbjerg
Universität Aarhus, private Mitteilung
- 49) J. Macek und J.S. Briggs
J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 6, 841 (1973)
- 50) N. Luz, H.O. Lutz, R. McMurray, R. v. Reenen
und S. Sackmann
Verhandl. DPG 12, 500 (1977)
N. Luz, S. Sackmann, H.O. Lutz, R. v. Reenen, R. McMurray
und I. v. Heerden
10th Int. Conf. on the Physics of Electronic and Atomic
Collisions, Abstract of Papers, Paris 1977, S. 888
- 51) J.U. Hansteen, O.M. Johnsen und L. Kochbach
Atomic and Nuclear Data Tables 15, 305 (1975)
W. Brandt, K.W. Jones und H.W. Kraner
Phys. Rev. Lett. 30, 351 (1973)
- 52) W. Brandt und K.W. Jones
Phys. Lett. 57A, 35 (1976)
- 53) M.H. Chen, B. Crasemann und D.L. Matthews
Phys. Rev. Lett. 34, 1309 (1975)
C.P. Bhalla
Phys. Rev. A12, 122 (1975)
- 54) J. Eichler und U. Wille
Phys. Rev. A11, 1973 (1975)

- 55) N. Stolterfoht
4th Conference on the Application of Small Accelerators,
Denton, 1976
- 56) P. Dahl, M. Rødbro, B. Fastrup und M.E. Rudd
J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 9, 1567 (1976)
- 57) W.R. Thorson
Phys. Rev. A12, 1365 (1975)
- 58) H.O. Lutz
Proc. 2nd Int. Conf. on Inner Shell Ionisation Phenomena,
Freiburg, 1976
- 59) F. Hund
Z. Phys. 40, 742 (1927)
- 60) R.S. Mulliken
Phys. Rev. 32, 186 (1928)
- 61) J.S. Briggs
Rep. Prog. Phys. 39, 217 (1976)
- 62) C.A. Coulson und A. Joseph
Int. J. Quant. Chem. 1, 337 (1967)
- 63) J. von Neumann und E.P. Wigner
Z. Phys. 30, 467 (1927)
- 64) N. Stolterfoht, D. Schneider, D. Burch, B. Aagaard,
E. Bøving und B. Fastrup
Phys. Rev. A12, 1313 (1975)

- 65) W. Lichten
Phys. Rev. 131, 229 (1963)
- 66) Yu.N. Demkov
Sov. Phys. - JETP 18, 138 (1964)
- 67) W.E. Meyerhof
Phys. Rev. Lett. 31, 1341 (1973)
Phys. Rev. A10, 1005 (1974)
- 68) G. Foster, T.P. Hoogkamer, P. Woerlee und F.W. Saris
J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 9, 1943 (1976)
- 69) H.O. Lutz, J. Stein, S. Datz und C.D. Moak
Phys. Rev. Lett. 28, 8 (1972)
- 70) H.O. Lutz, W.R. McMurray, R. Pretorius, R.J. van Reenen
und I.J. van Heerden
zur Veröffentlichung in Phys. Rev. Lett.
- 71) W.E. Meyerhof, R. Anholt und T.K. Saylor
Phys. Rev. A16, 169 (1977)
- 72) K. Taulbjerg
Proc. 2nd Int. Conf. on Inner Shell Ionisation Phenomena,
Freiburg, 1976
- 73) J.D. Power
Phil. Trans. Roy. Soc. A274, 663 (1973)
- 74) R. Anholt und W.E. Meyerhof
Phys. Rev. A16, 190 (1977)

75) C.W. Woods, R.L. Kauffman, K.A. Jamison, N. Stolterfoht
und P. Richard
Phys. Rev. A12, 1393 (1975)

Anhang: Intensitätsverteilung bei der Aussendung von Auger-elektronen durch bewegte Atome

Die Situation bei Aussendung eines Augerelektrones im Fluge läßt sich am Vektordiagramm der Abb. 24 veranschaulichen.³⁴⁾

Der Schwerpunkt des Gesamtsystems, in diesem Fall mit dem Kern des emittierenden Atoms identisch, bewegt sich mit der Geschwindigkeit \underline{v} . Die Emission erfolgt im Schwerpunktsystem mit der durch die Bindungsenergie festgelegten Geschwindigkeit \underline{v}' .

Bei Beobachtung des Zerfalls unter dem Winkel β hat das Elektron im Laborsystem die Geschwindigkeit \underline{v} . Aus dem Diagramm liest man unmittelbar folgende Beziehung ab:

$$\operatorname{tg} \beta = \frac{v' \sin \beta'}{v + v' \cos \beta'} = \frac{\sin \beta'}{k + \cos \beta'} \quad \text{mit } k = \frac{v}{v'}, \quad (\text{A } 1)$$

Daraus folgt durch Auflösung nach $\cos \beta'$

$$\cos \beta' = -k \sin^2 \beta \pm \cos \beta (1 - k^2 \sin^2 \beta)^{1/2} \quad (\text{A } 2)$$

Physikalisch sinnvoll ist nur das positive Vorzeichen in Gl. A2, da für $\beta = 0$ auch $\beta' = 0$ folgen muß.

Die Intensitätsverteilungen im Schwerpunktsystem $I(\beta')$ und im Laborsystem $I(\beta)$ sind über die entsprechenden Raumwinkel verknüpft durch die Relation:

$$I(\beta) 2\pi \sin \beta d\beta = I(\beta') 2\pi \sin \beta' d\beta' \quad (\text{A } 3)$$

oder

$$\frac{I(\beta)}{I(\beta')} = \frac{\sin \beta' d\beta'}{\sin \beta d\beta} = \frac{d(\cos \beta')}{d(\cos \beta)}$$

Mit Gl. A2 ergibt sich nach Umformung

$$\frac{I(\beta)}{I(\beta')} = \frac{[(1 - k^2 \sin^2 \beta)^{1/2} + k \cos \beta]^2}{(1 - k^2 \sin^2 \beta)^{1/2}} \quad (\text{A } 4)$$

In den hier betrachteten Fällen ist die Größe k , die das Verhältnis der Geschwindigkeiten von emittierendem Kern und emittiertem Elektron im Ruhesystem des Kerns angibt, etwa $k \approx 0,1$. Deshalb kann man in (A4) Glieder mit k^2 vernachlässigen. Es gilt dann näherungsweise

$$\frac{I(\beta)}{I(\beta')} \approx 1 + 2k \cos \beta \quad (A5)$$

Für isotrope Verteilung im Schwerpunktsystem $I(\beta') = \text{const}$ findet man die in Abb. 25 dargestellte Abhängigkeit vom Laborstreuungswinkel.

In den hier durchgeführten Koinzidenzexperimenten erfolgte die Beobachtung der Augerelektronen unter 90° zum Primärstrahl. Für Streuung unter einem Winkel ϑ ist ein maximaler Winkel β gegeben durch: $\beta = 90^\circ \pm \vartheta$. Da die 4 im Experiment eingesetzten Ionenzähler Ionenzähler symmetrisch zu einer Ebene senkrecht zum Elektronenspektrometer angeordnet waren, entnimmt man Abb. 25, daß die erhöhte Elektronenintensität für $\beta = 90^\circ - \vartheta$ gerade kompensiert wird durch die verminderte Intensität bei $\beta = 90^\circ + \vartheta$. In diesem Fall kann von dem aufgezeigten kinematischen Effekt keine Verschiebung der experimentellen Daten herrühren.

Etwas anders ist die Situation bei Messungen mit nur drei asymmetrisch angeordneten Ionenzählern. Hierbei kann man gewisse Auswirkungen auf die Daten erwarten. Abweichungen vom Mittelwert 1 nehmen mit wachsendem ϑ zu. Allerdings sinkt dabei die Schwerpunktsgeschwindigkeit \underline{v} und damit k wegen des ansteigenden Impulsübertrags bei größeren Streuwinkeln. Daher ist es notwendig, für jeden Streuwinkel den entsprechenden Intensitätsverlust oder -anstieg nach (A 5) unter Berücksichtigung der Stoßkinematik zu

berechnen, wenn eine asymmetrische Zähleranordnung bezüglich der Ebene senkrecht zum Spektrometer vorliegt.

Bis auf zwei Ausnahmen sind die in Kapitel 5 gezeigten Messungen alle mit 4 Ionenzählern in symmetrischer Anordnung gemessen.

Ausnahmen sind die 380 keV $\text{Mg}^+ - \text{Ne}$ Daten und die Vergleichsmessung $\text{Ne}^+ - \text{O}_2$ und $\text{Ne}^+ - \text{H}_2\text{O}$ bei 385 keV Primärenergie. Für diese Meßreihen wurden die erwarteten Abweichungen nach Gleichung A5 berechnet. Für das $\text{Mg}^+ - \text{Ne}$ System ergibt sich, daß beim größten Streuwinkel $\vartheta = 27^\circ$ die Augerelektronenmessung um etwa 2% zu tief liegt. In der Vergleichsmessung $\text{Ne}-\text{O}_2$ und $\text{Ne}^+ - \text{H}_2\text{O}$ dagegen liegen die Daten bei dem größten gemessenen Streuwinkel $\vartheta = 27^\circ$ um etwa 4% zu hoch. Wegen der unterschiedlichen Zählergeometrie wirkt der Effekt in beiden Experimenten in die entgegengesetzte Richtung.

Diese Abweichungen, die innerhalb der angegebenen Fehlergrenzen liegen, nehmen zu kleineren Streuwinkeln hin rasch ab, (z.B. ca. 1% bei $\vartheta = 10^\circ$), so daß auch der hier diskutierte Effekt keinen wesentlichen Einfluß auf die Lage der experimentellen Daten nehmen kann.

Verzeichnis der Abbildungen

Abb.1 Schematisches Korrelationsdiagramm für das Argon-Argon Quasimolekül ⁷⁾

Abb.2 Neon - Sauerstoff Korrelationsdiagramm

Abb.3 Schemazeichnung der Koinzidenzapparatur

Abb.4 Vektordiagramm zur Stoßkinematik

b = Stoßparameter; \underline{v}_s = Schwerpunktschwindigkeit

Abb.5 Prinzipbild des 400 kV Ionenbeschleunigers

Abb.6 Übersichtsdarstellung der Strahlkollimation und der Nachweisinstrumente

Abb.7 Experimentelle Bestimmung der vom Röntgen- bzw. Elektronendetektor eingesehenen Targetlänge

Abb.8 Relative Winkelunschärfe in Abhängigkeit vom Laborstreuungswinkel für Röntgenzählrohr und Elektronenspektrometer

Abb.9 Verlauf des differentiellen Streuquerschnitts $\sigma(\vartheta)$ im Winkelintervall $\Delta\vartheta$ (durchgezogene Linie). $\sigma = \text{const}$ (gestrichelte Linie)

Abb.10 Blockschaltbild der Meßelektronik

$D \hat{=}$ Ionendetektor, $EV \hat{=}$ Elektronenvervielfacher,
 $DZ \hat{=}$ Durchflußzählrohr, $VV \hat{=}$ Vorverstärker,
 $HV \hat{=}$ Hauptverstärker, $FHV \hat{=}$ Filter-Hauptverstärker,
 $FD \hat{=}$ Fensterdiskriminator, $CFD \hat{=}$ constant fraction
Diskriminator, $RM \hat{=}$ Ratenmeßgerät, $Z \hat{=}$ Zählgerät,
 $V \hat{=}$ Verzögerungsglied, $LT \hat{=}$ Lineares Tor,

ZAK $\hat{=}$ Zeit-Amplituden Konverter, $\Sigma \hat{=}$ Summenstufe,
 ADC $\hat{=}$ Analog-Digital Konverter

Abb.11 Vergleich der Meßresultate für Ion-Augerelektron Koinzidenzen in 250 keV $\text{Ne}^+ - \text{O}_2$ Stößen mit den theoretischen Rechnungen nach der Vierzustandsnäherung¹⁵⁾ (durchgezogene Kurve). Die Fehlerbalken repräsentieren den statistischen Fehler.

Abb.12 363 keV $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$. Vergleich der experimentellen Daten aus Ion-Röntgenquant (\square, \times^{13}) und Ion-Augerelektron Koinzidenzen (\circ).

Abb.13a 385 keV $\text{Ne}^+ - \text{O}_2$. (Legende s. Abb.11)

Abb.13b 308 keV $\text{O}^+ - \text{Ne}$. (Legende s. Abb.11)

Abb.14 400 keV $\text{O}^+ - \text{O}_2$. Die theoretische Kurve wurde den Tabellen (Ref. 16) entnommen.

Abb.15 400 keV $\text{N}^+ - \text{N}_2$. (Legende s. Abb.14)

Abb.16 Totaler Wirkungsquerschnitt in Abhängigkeit von der Energie für $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$, $\text{Na}^+ - \text{Ne}$ und $\text{Mg}^+ - \text{Ne}$ Stöße. Die gestrichelten Kurven sind von Hand eingezeichnet, um die experimentellen Daten zu verbinden.

Abb.17a 420 keV $\text{Na}^+ - \text{Ne}$. Experimentelle Daten aus Ion-Photon Koinzidenzmessungen. Theoretische Kurve aus Ref. 16

Abb.17b 380 keV $\text{Mg}^+ - \text{Ne}$. (Legende s. Abb.14)

Abb.18 $N_{\text{A}}(v_{\text{A}}) \sim \sigma_{\text{tot}}^{\text{K}} / \sigma_{\text{tot}}^{\text{ref}}$ gegen α / v_{A} (vgl. Abschnitt 2.2.3) für $\text{Na}^+ - \text{Ne}$ und $\text{Mg}^+ - \text{Ne}$. Durchgezogene Kurve: $\ln N_{\text{A}}(v_{\text{A}}) \sim \alpha / v_{\text{A}}$ aus Ref. 71.

Abb.19 385 keV $\text{Ne}^+ - \text{O}_2$

- ☐ Ion-Röntgenquant Koinzidenzen
- ☒ Ion-Augerelektronen Koinzidenzen

Abb.20 Vergleichsmessung 385 keV $\text{Ne}^+ - \text{O}_2$ und 385 keV $\text{Ne}^+ - \text{H}_2 \text{O}$

Abb.21 308 keV $\text{O}^+ - \text{Ne}$

- ☐ Ion-Röntgenquant Koinzidenzen
- ☒ Ion-Augerelektron Koinzidenzen

Abb.22 Abhängigkeit der Fluoreszenzausbeute ω_K vom Stoßparameter b für alle Systeme, bei denen gleichzeitige Koinzidenzmessungen zwischen Ion und Röntgenquant bzw. Ion und Augerelektron durchgeführt wurden.

Abb.23a - d Abhängigkeit der Fluoreszenzausbeute ω_K von der Primärenergie und dem Ladungszustand der eingeschossenen Ionen.

Abb.24 Vektordiagramm zur Emission von Augerelektronen aus bewegten Atomen.

\underline{v} = Geschwindigkeit des emittierten Elektrons im Laborsystem

\underline{v}' = Geschwindigkeit des Elektrons im Ruhesystem des emittierenden Teilchens

\underline{V} = Geschwindigkeit des emittierenden Teilchens

Abb.25 Verhältnis der Elektronenintensitäten im Labor- und Schwerpunktsystem in Abhängigkeit vom Winkel zwischen Beobachtungsrichtung und Flugrichtung des emittierenden Atoms. ($k=V/v'$)

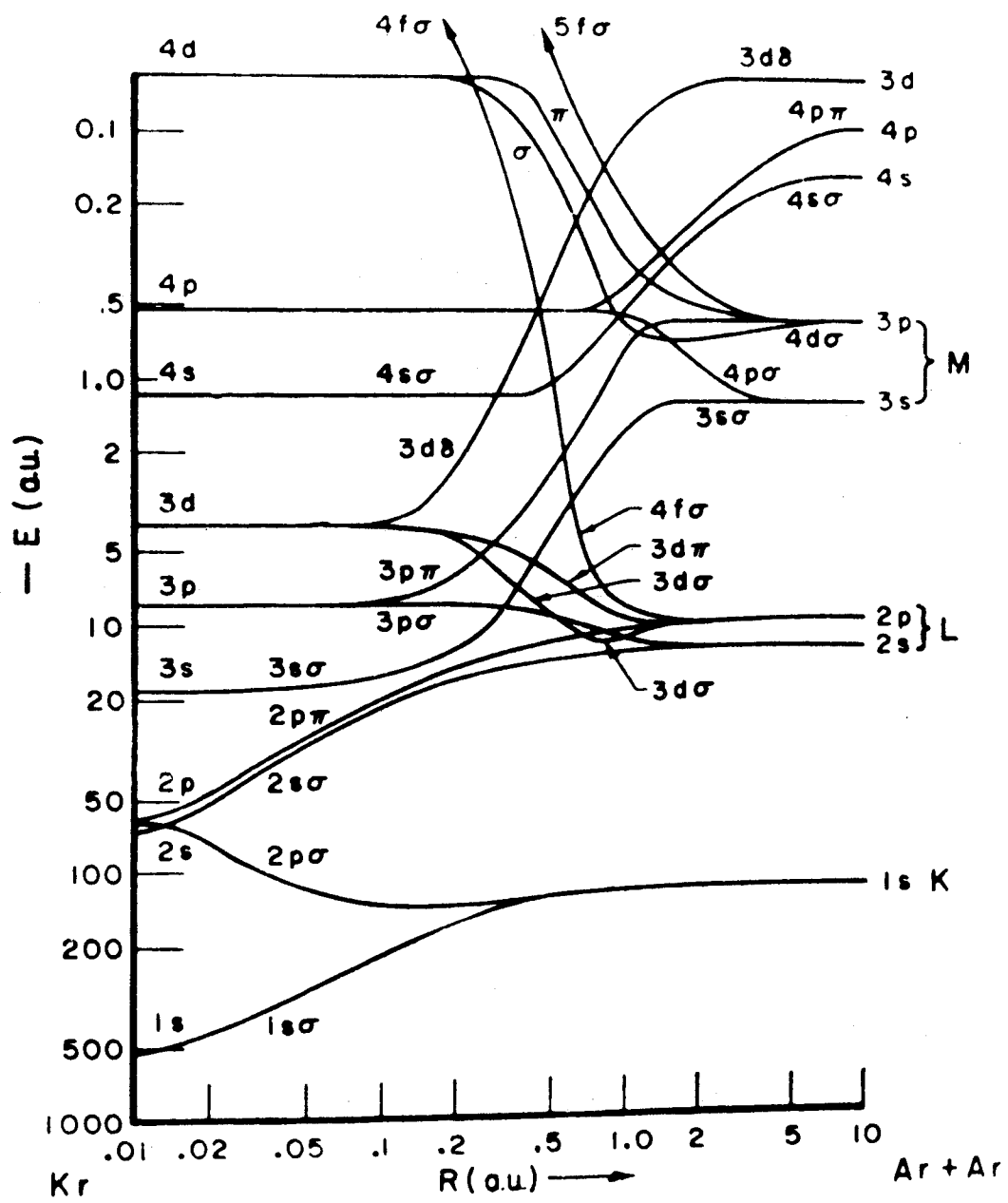


Abb.1

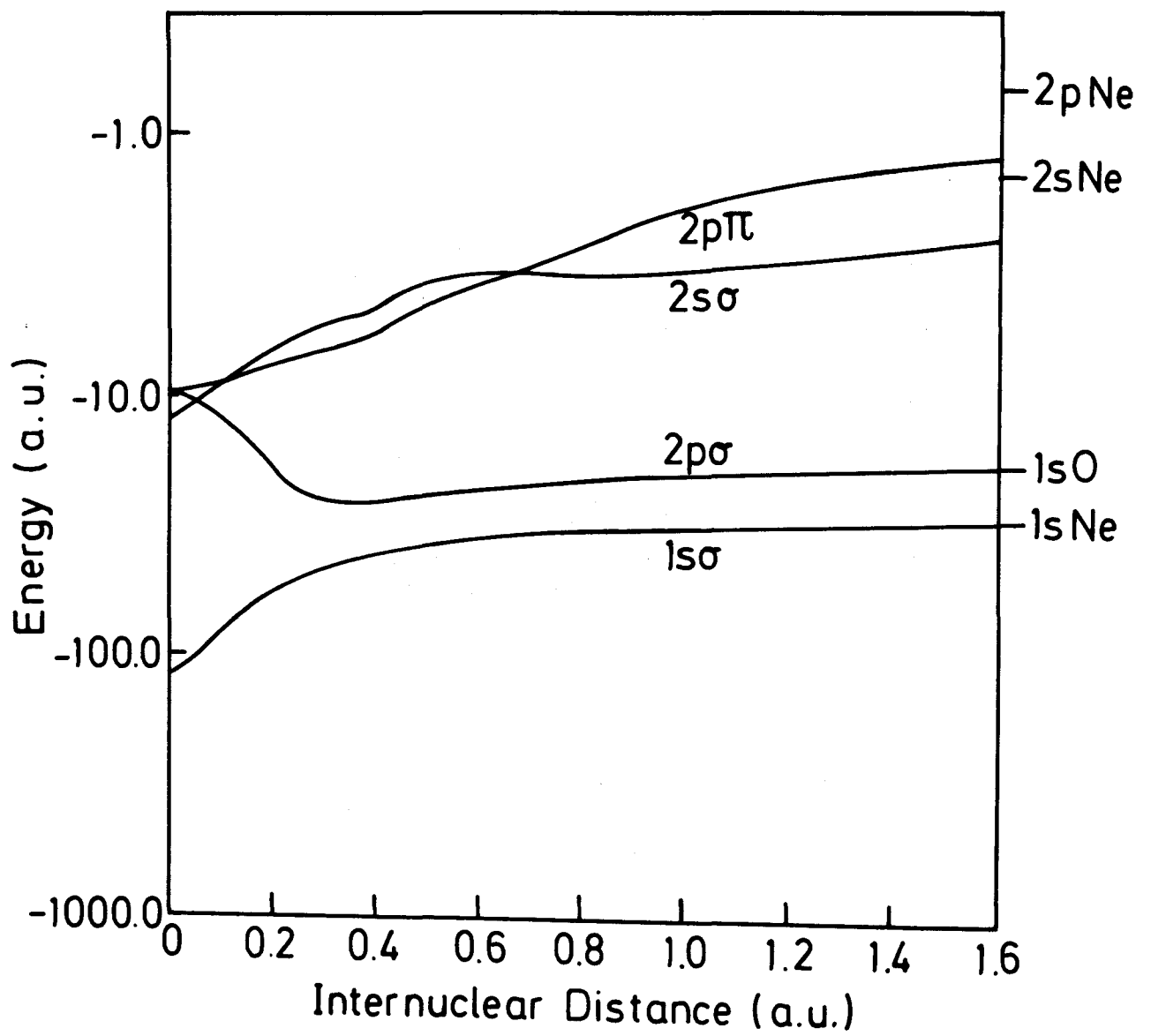


Abb.2

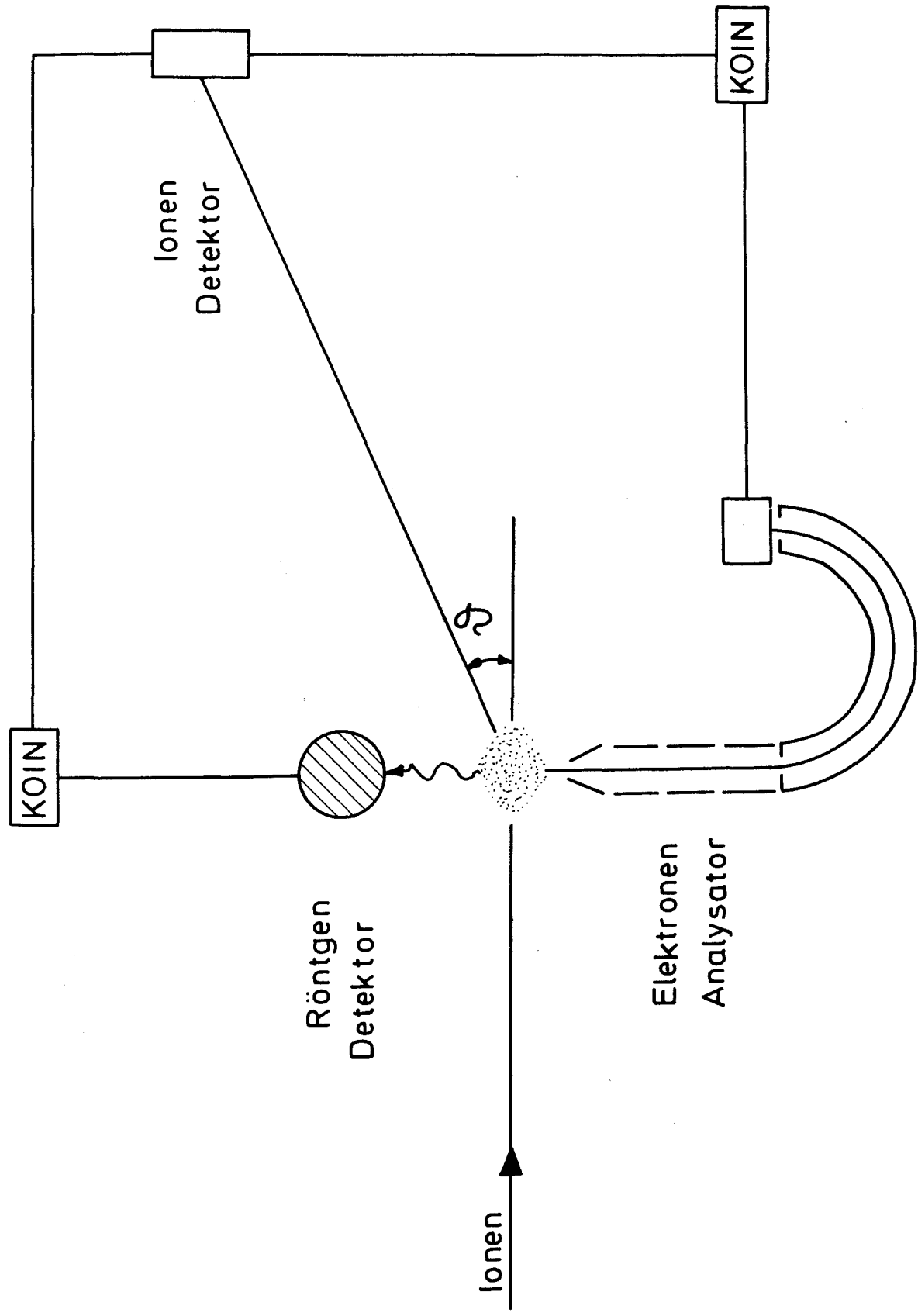


Abb. 3

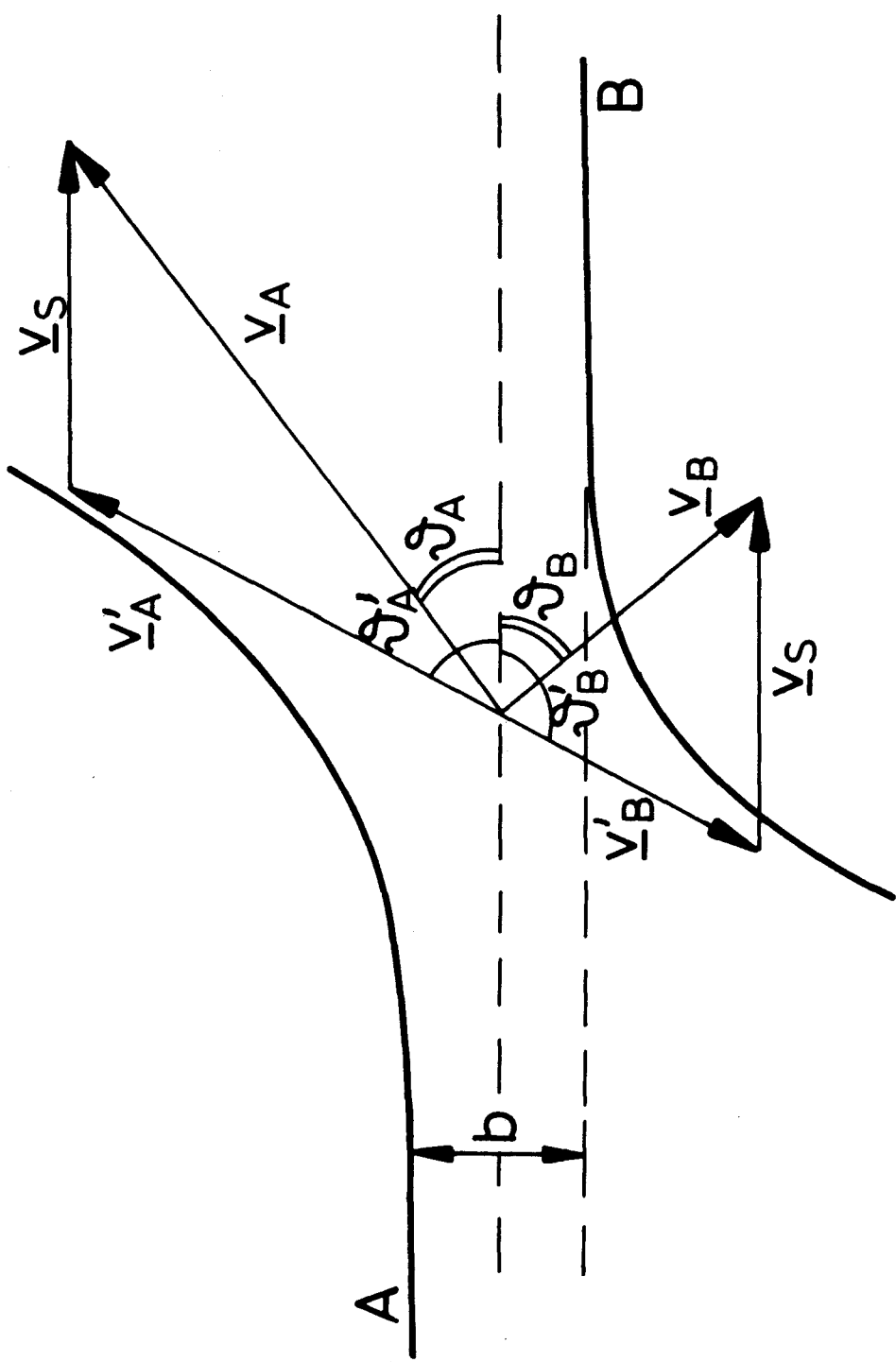


Abb.4

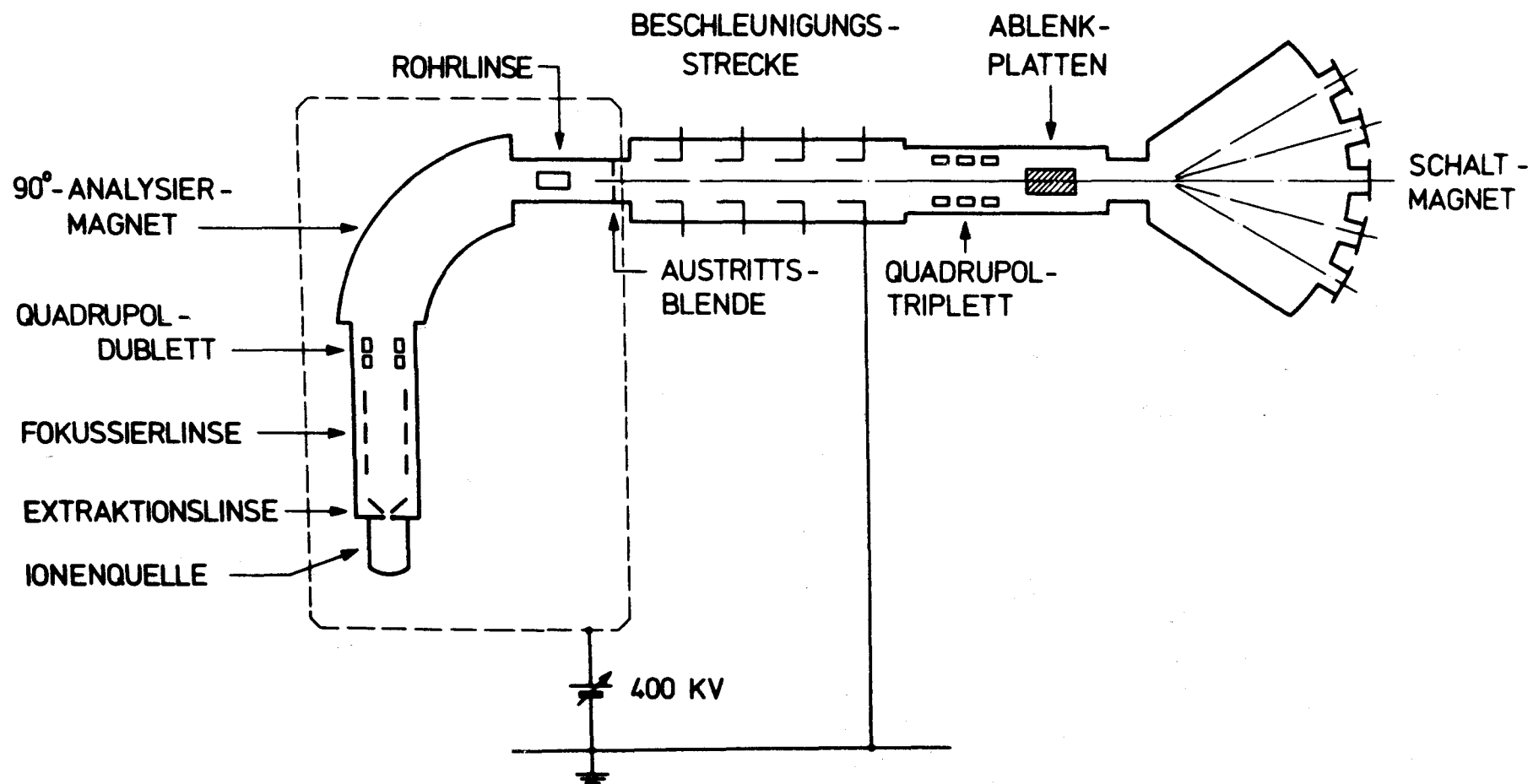


Abb. 5

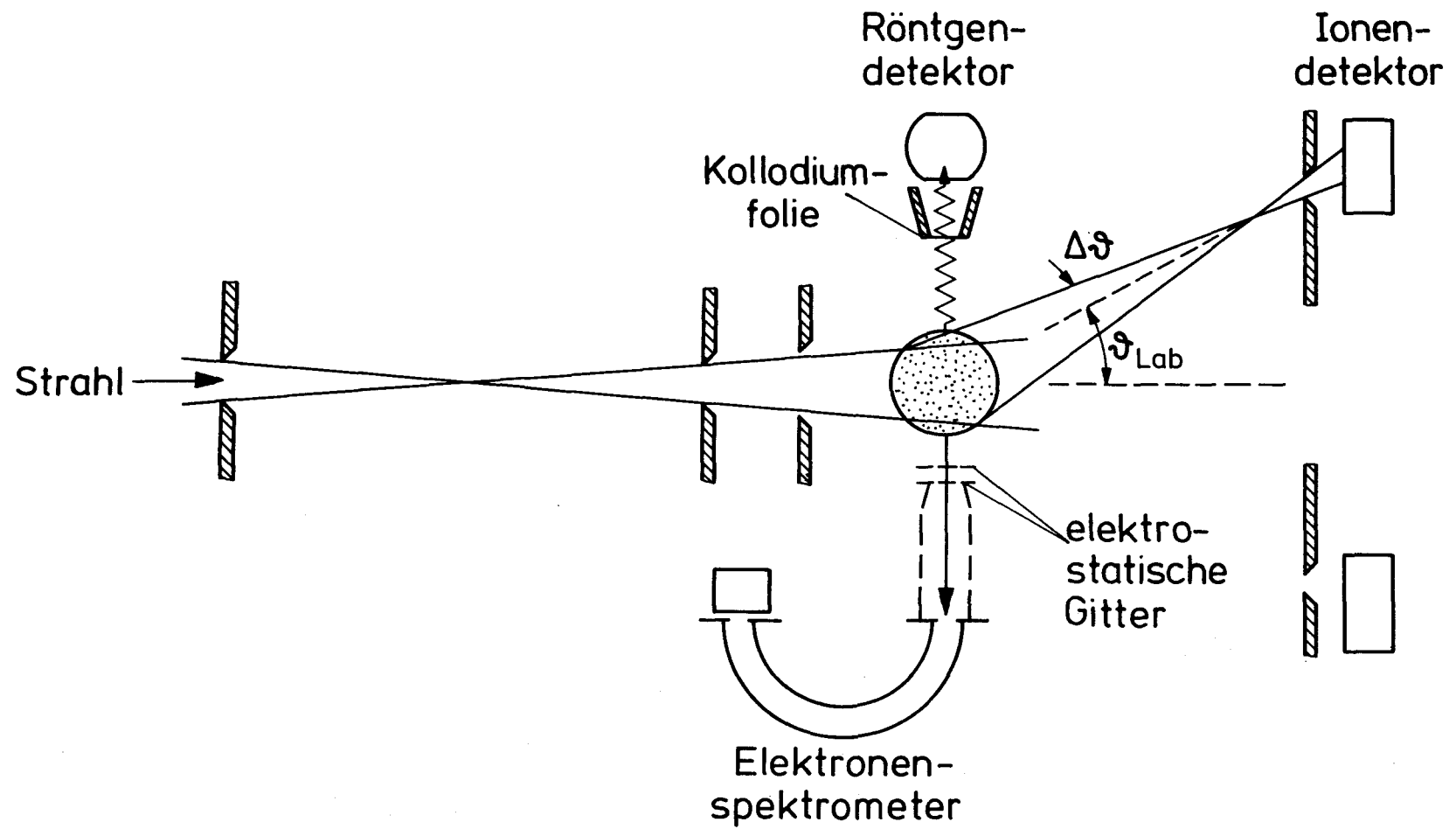


Abb.6

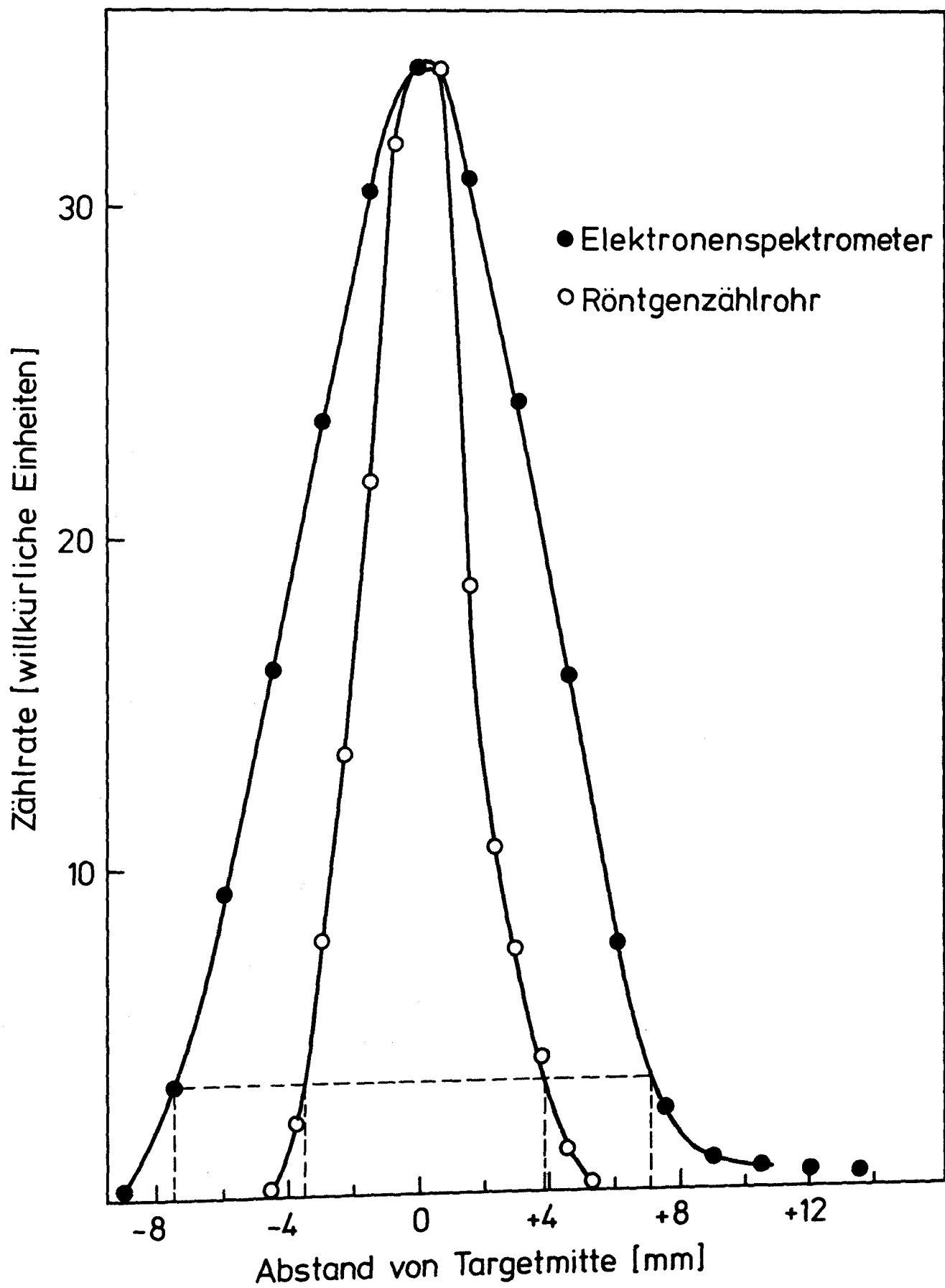


Abb.7

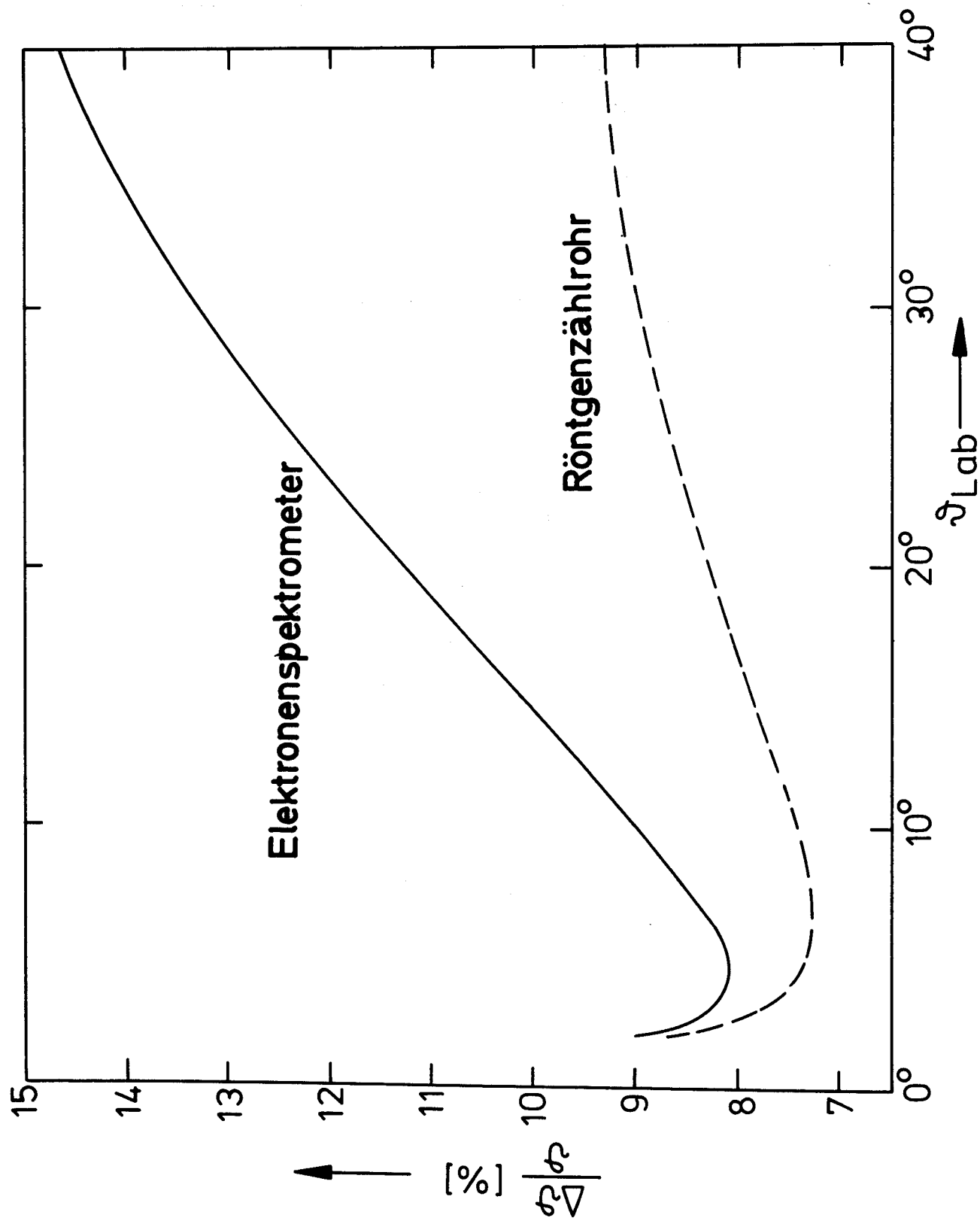


Abb.8

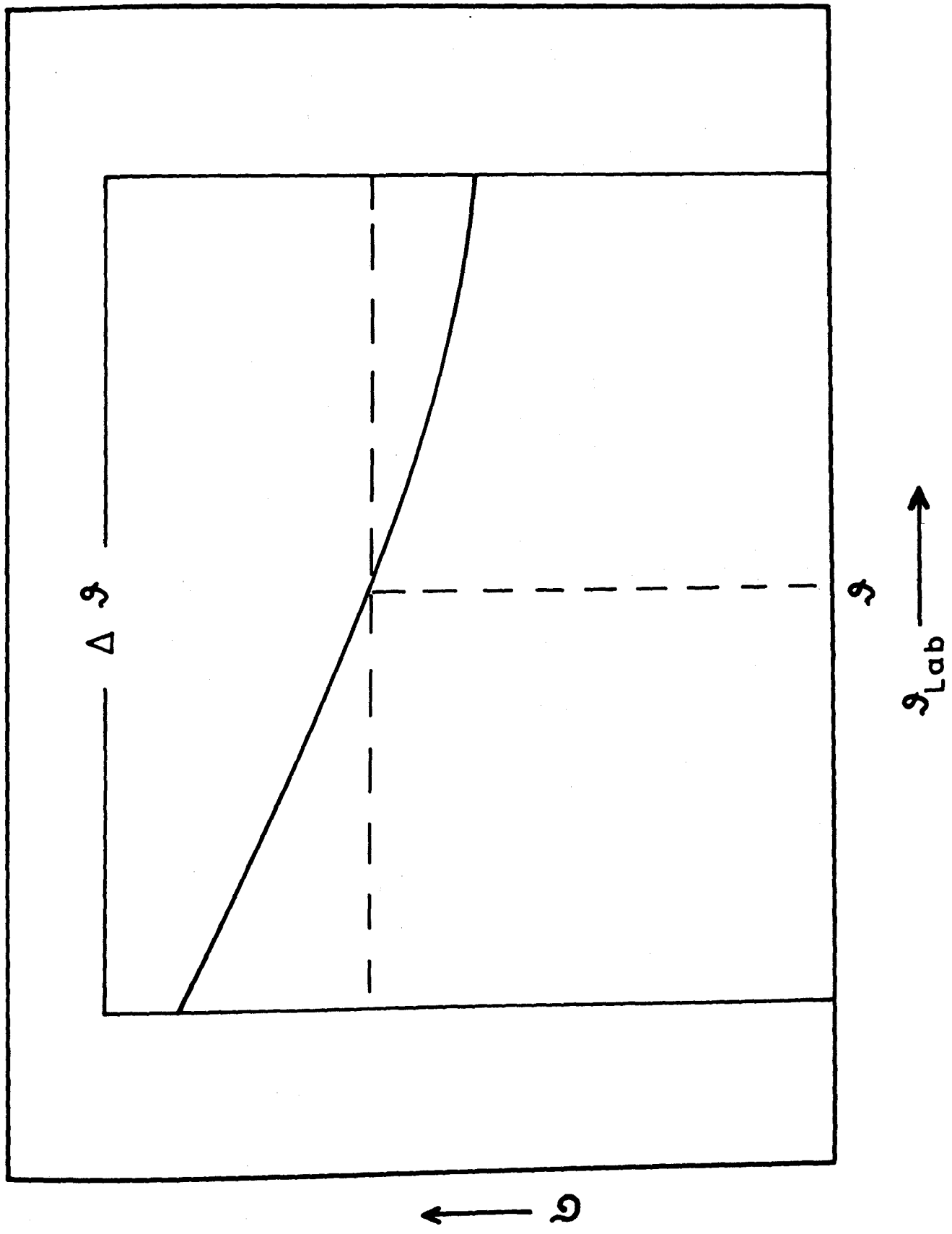


Abb.9

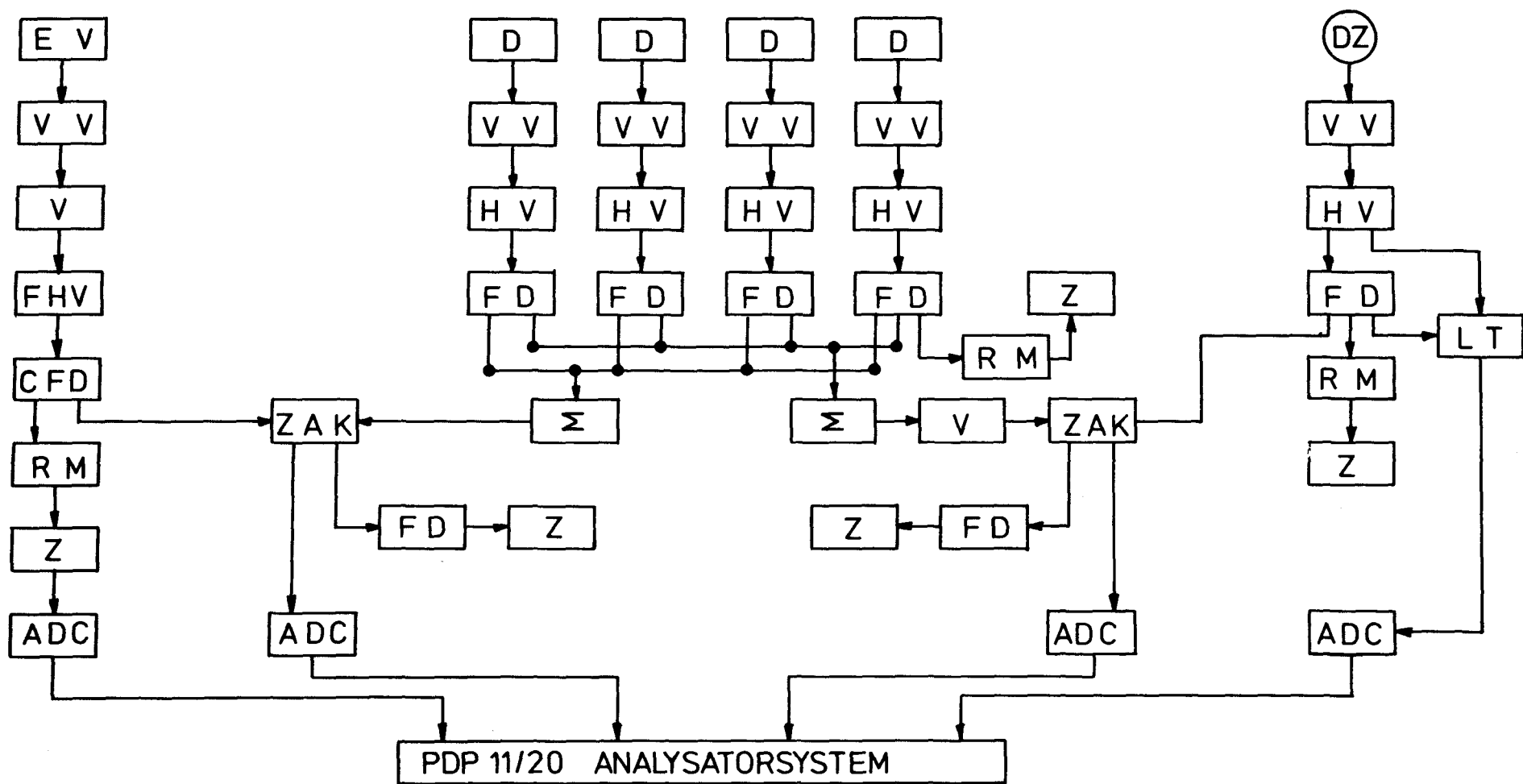


Abb.10

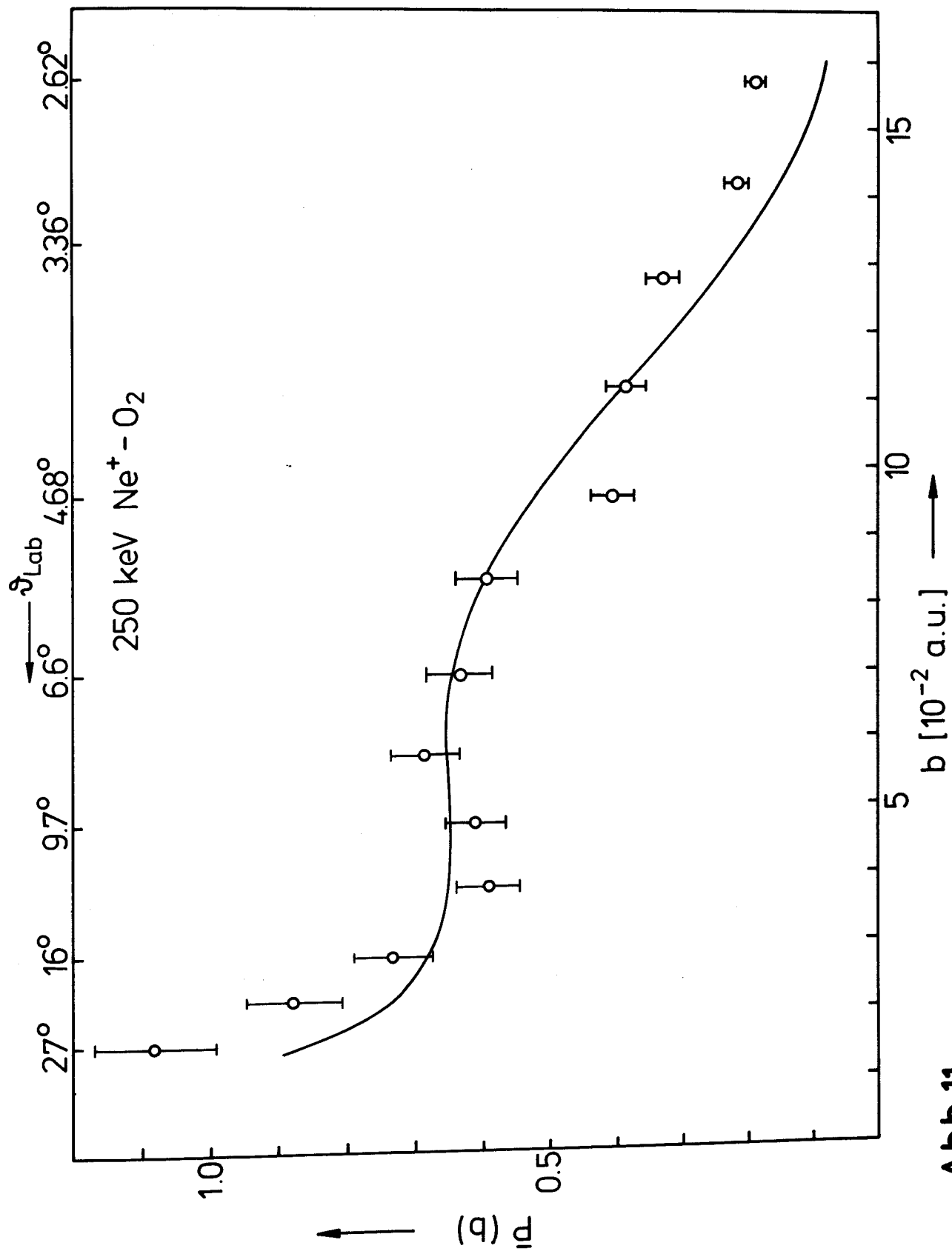


Abb.11

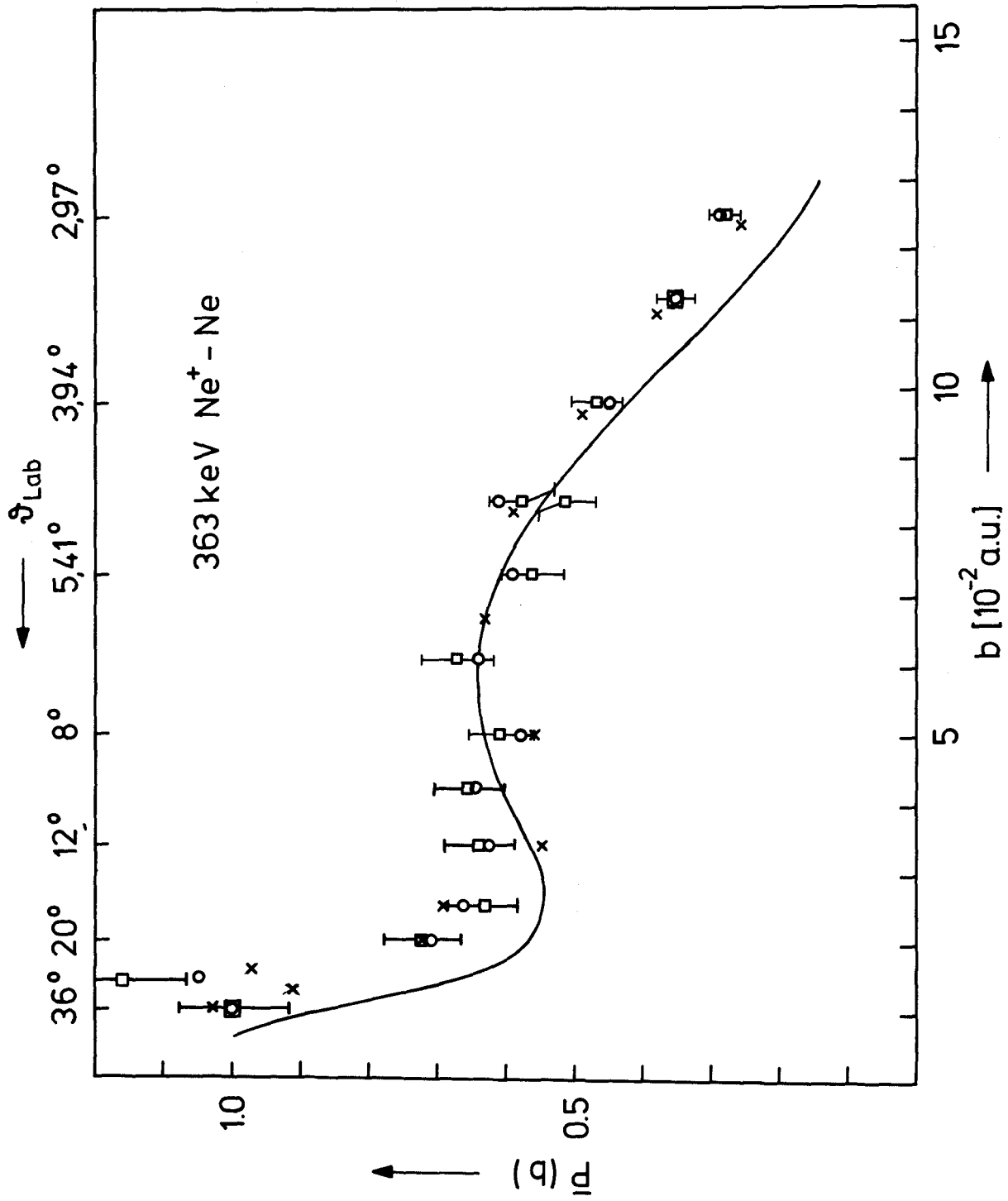


Abb. 12

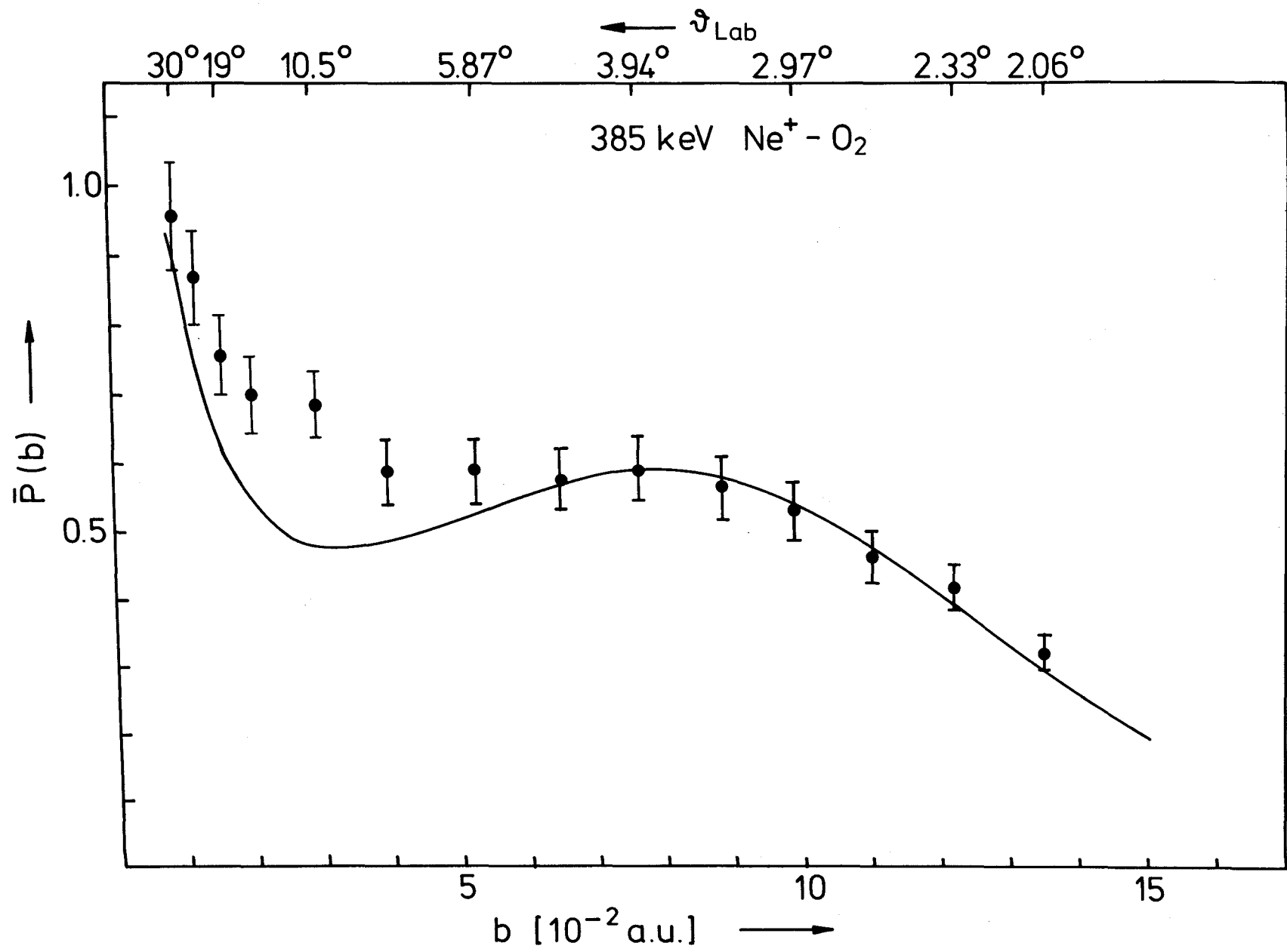


Abb.13a

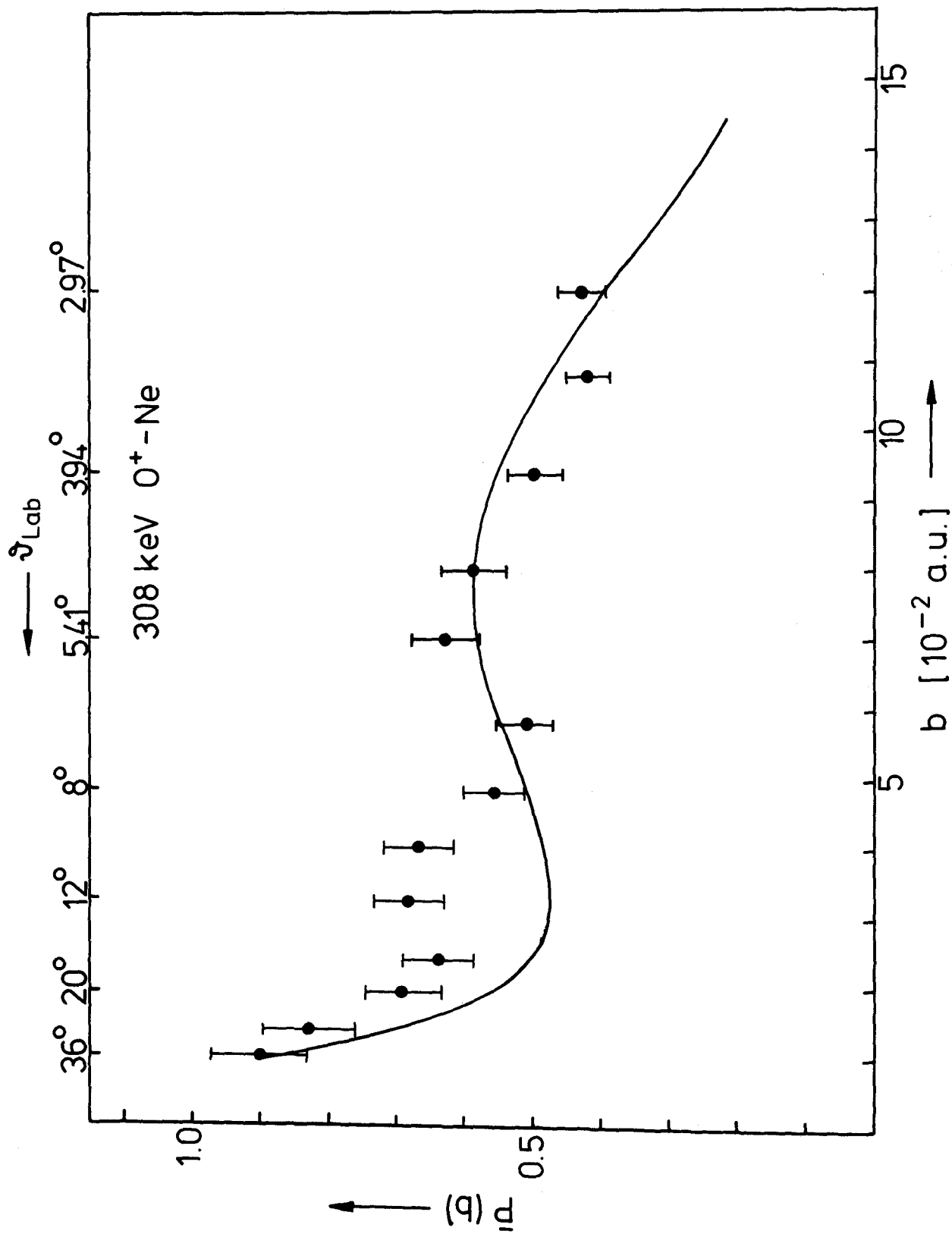


Abb.13b

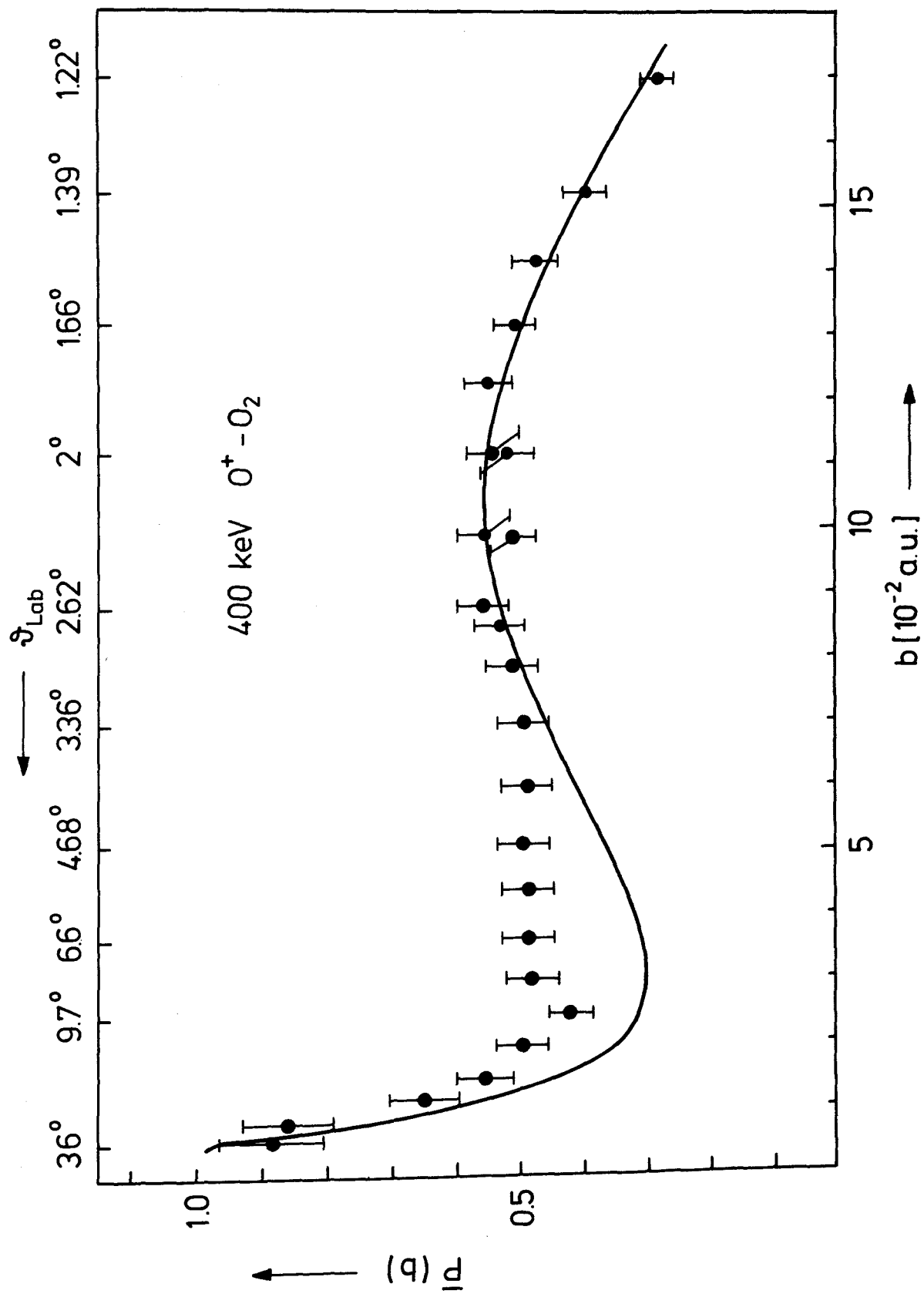


Abb.14

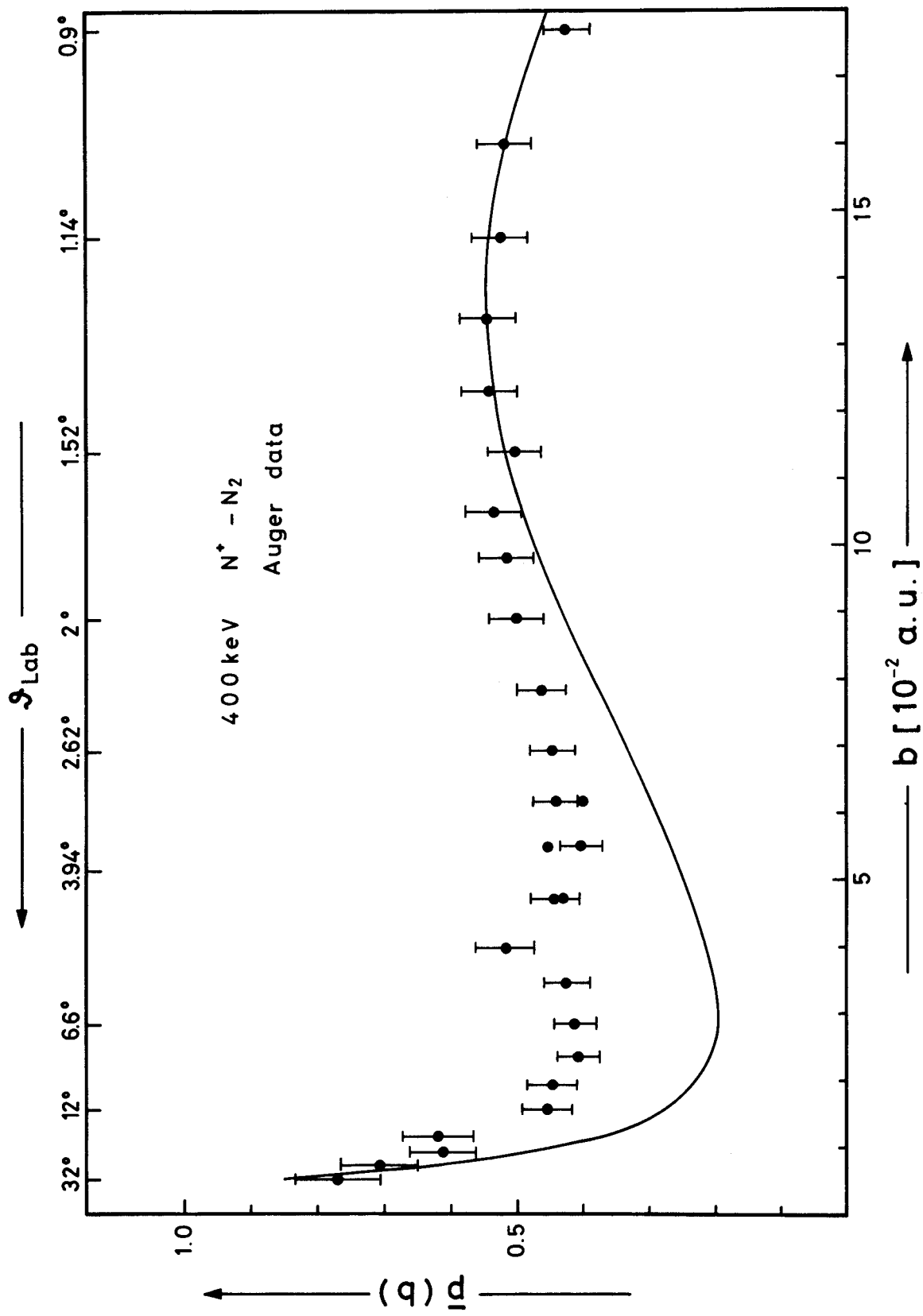


Abb.15

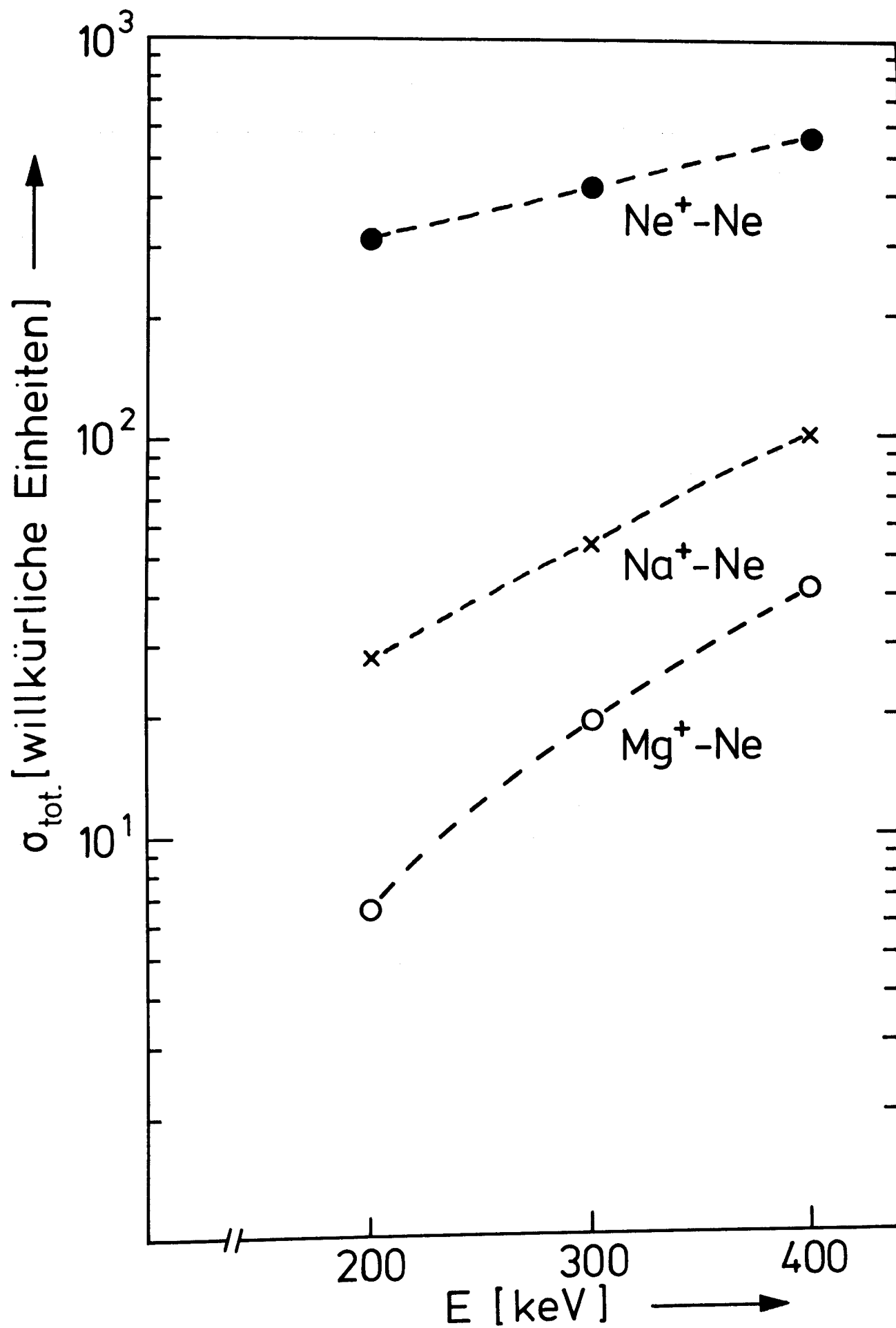


Abb.16

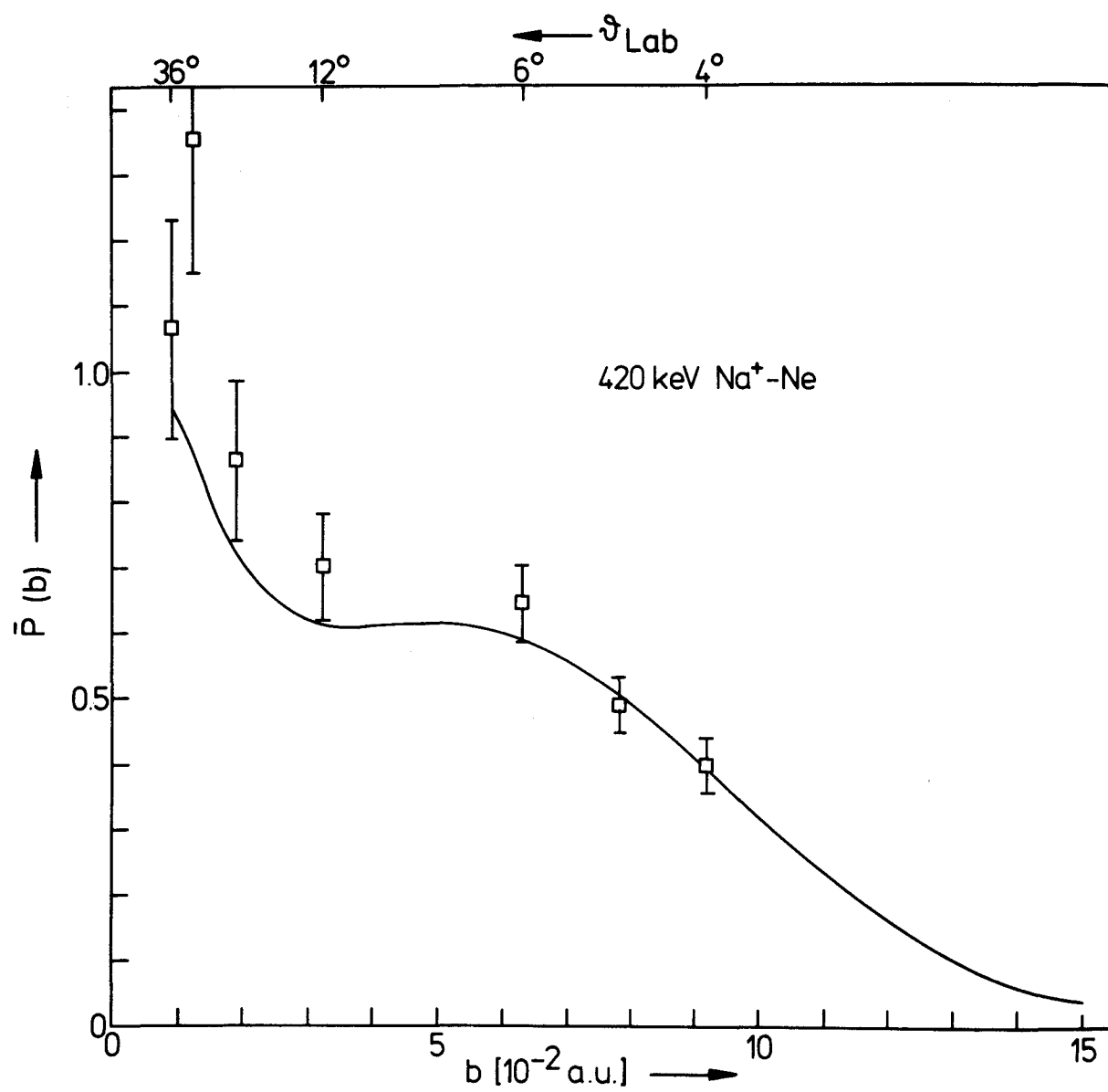


Abb.17a

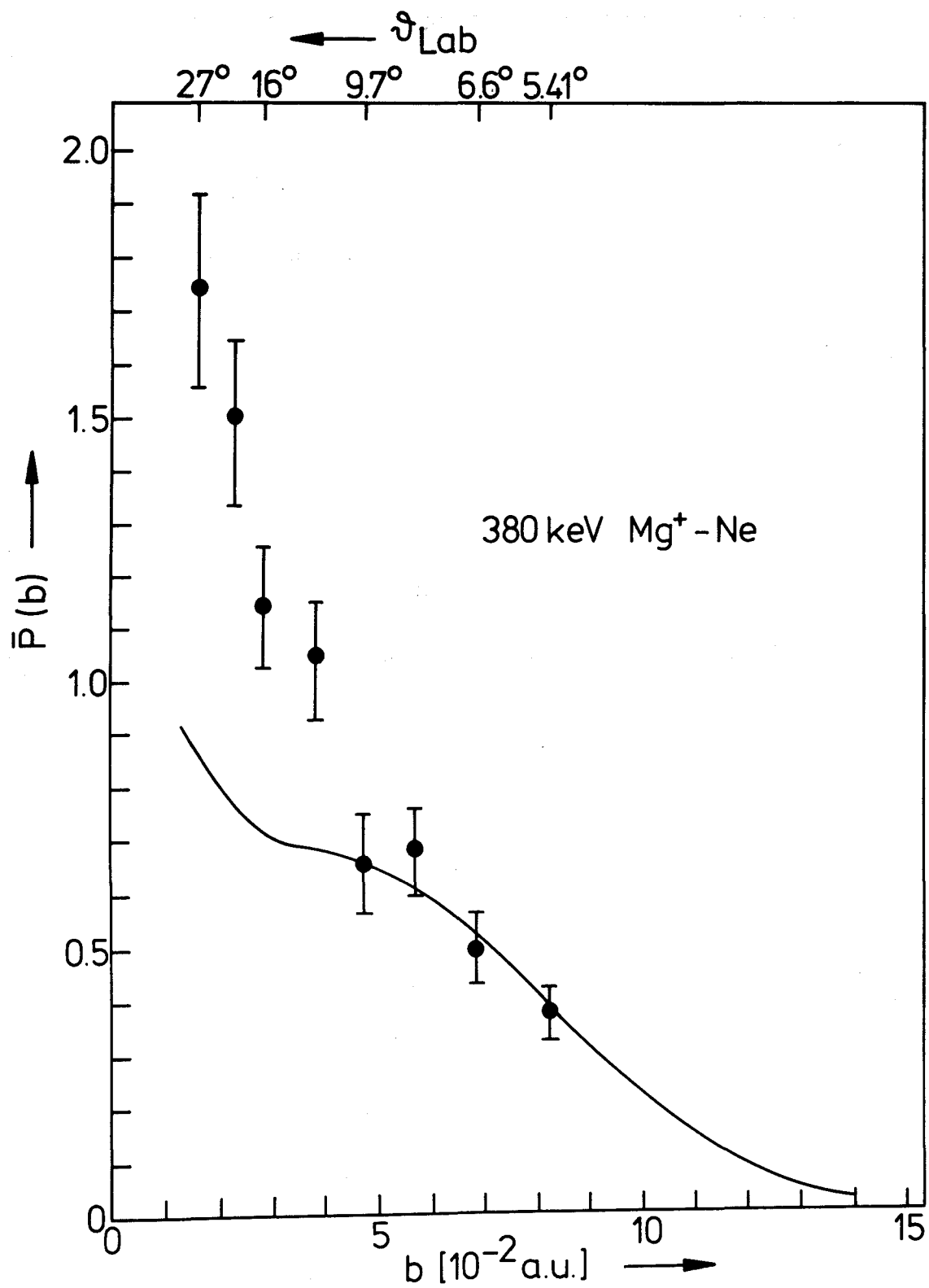


Abb. 17b

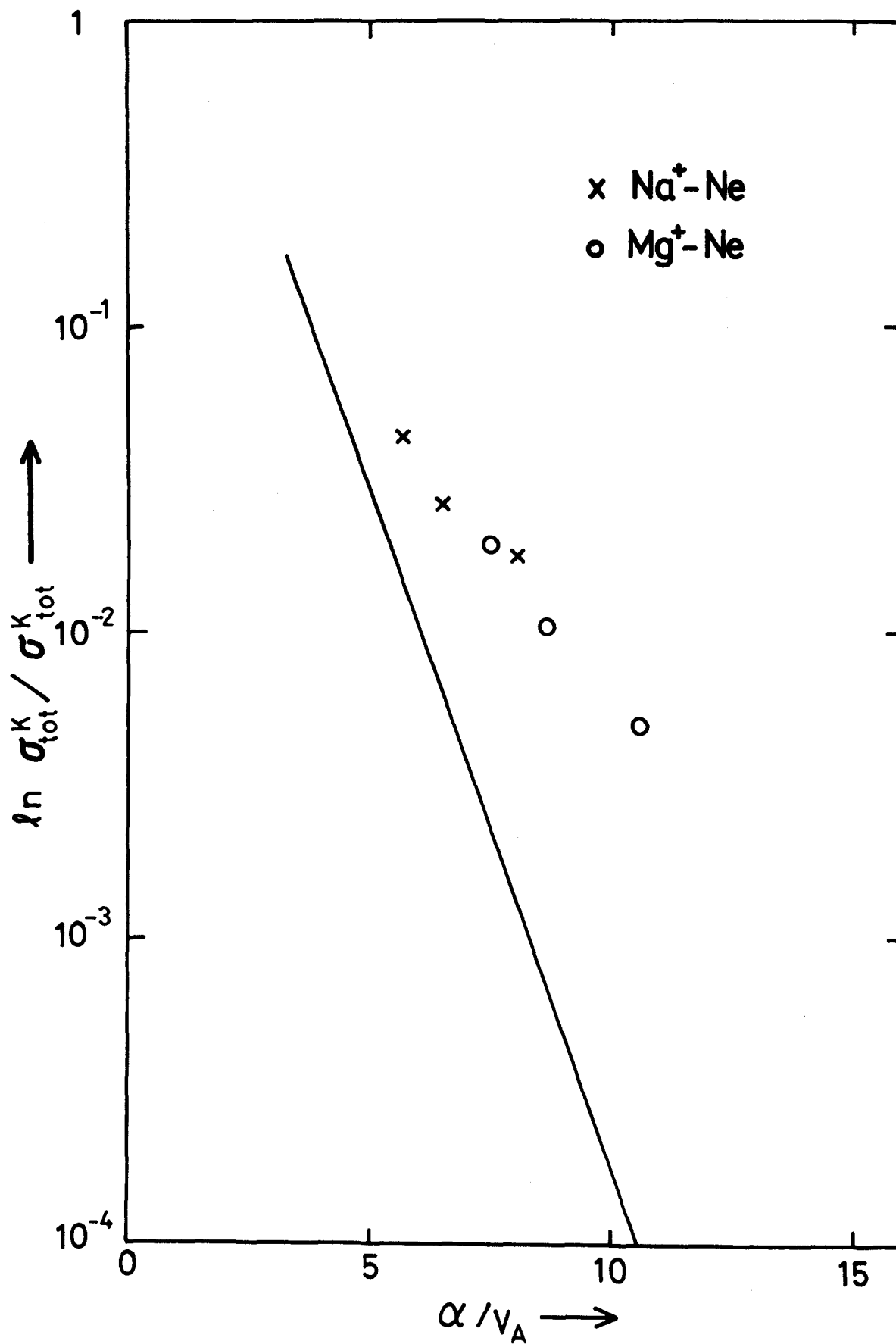


Abb.18

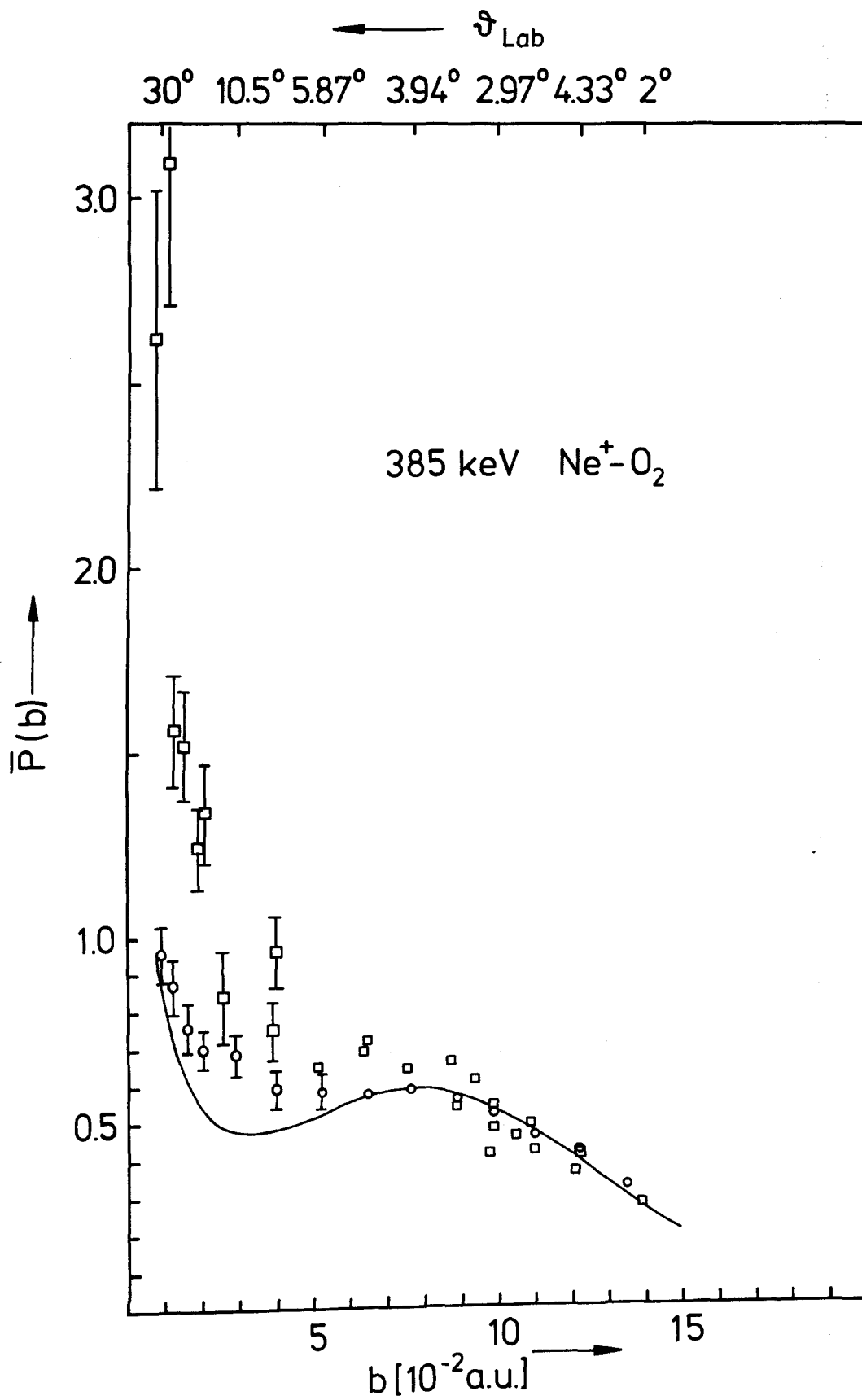


Abb. 19

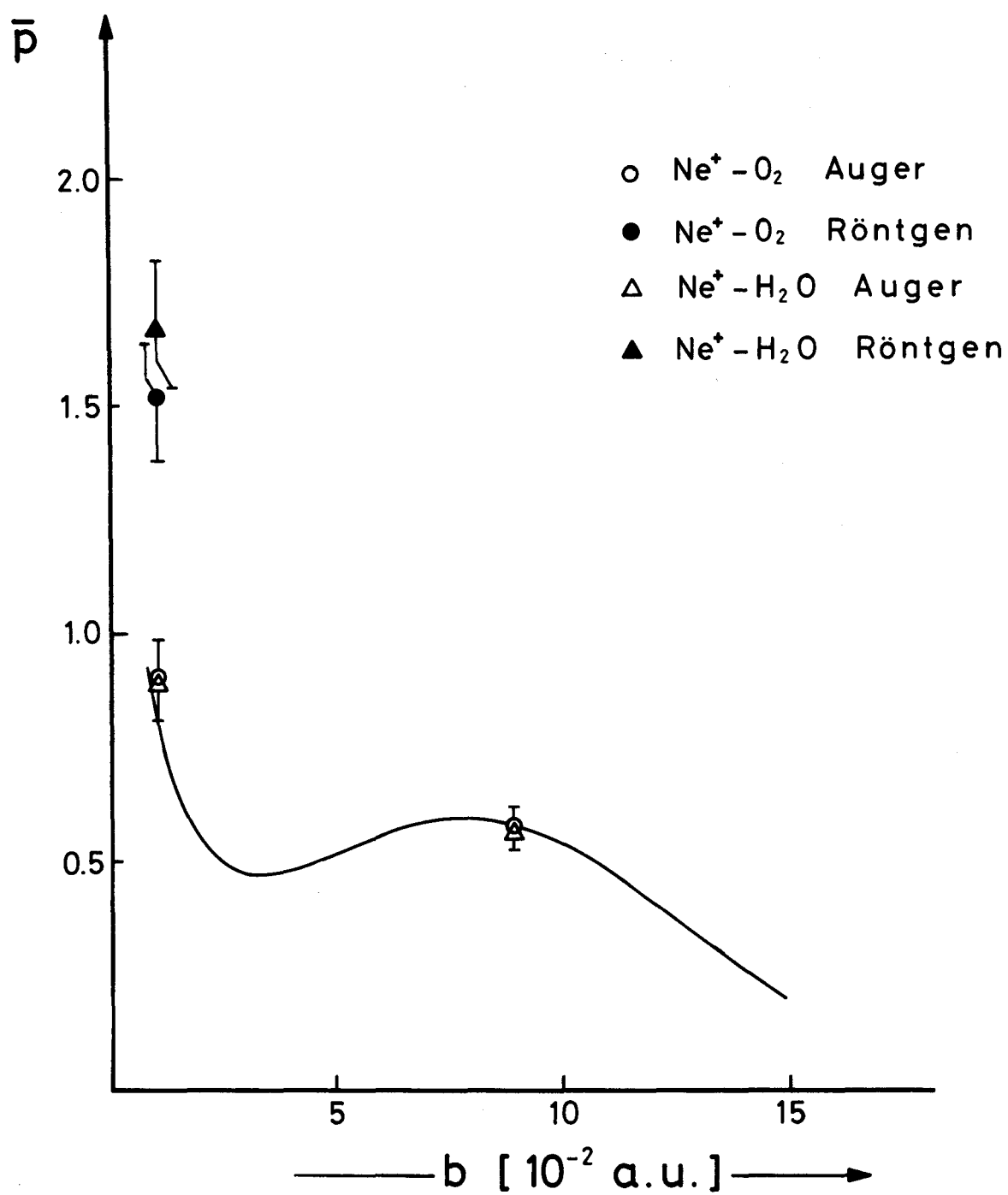


Abb. 20

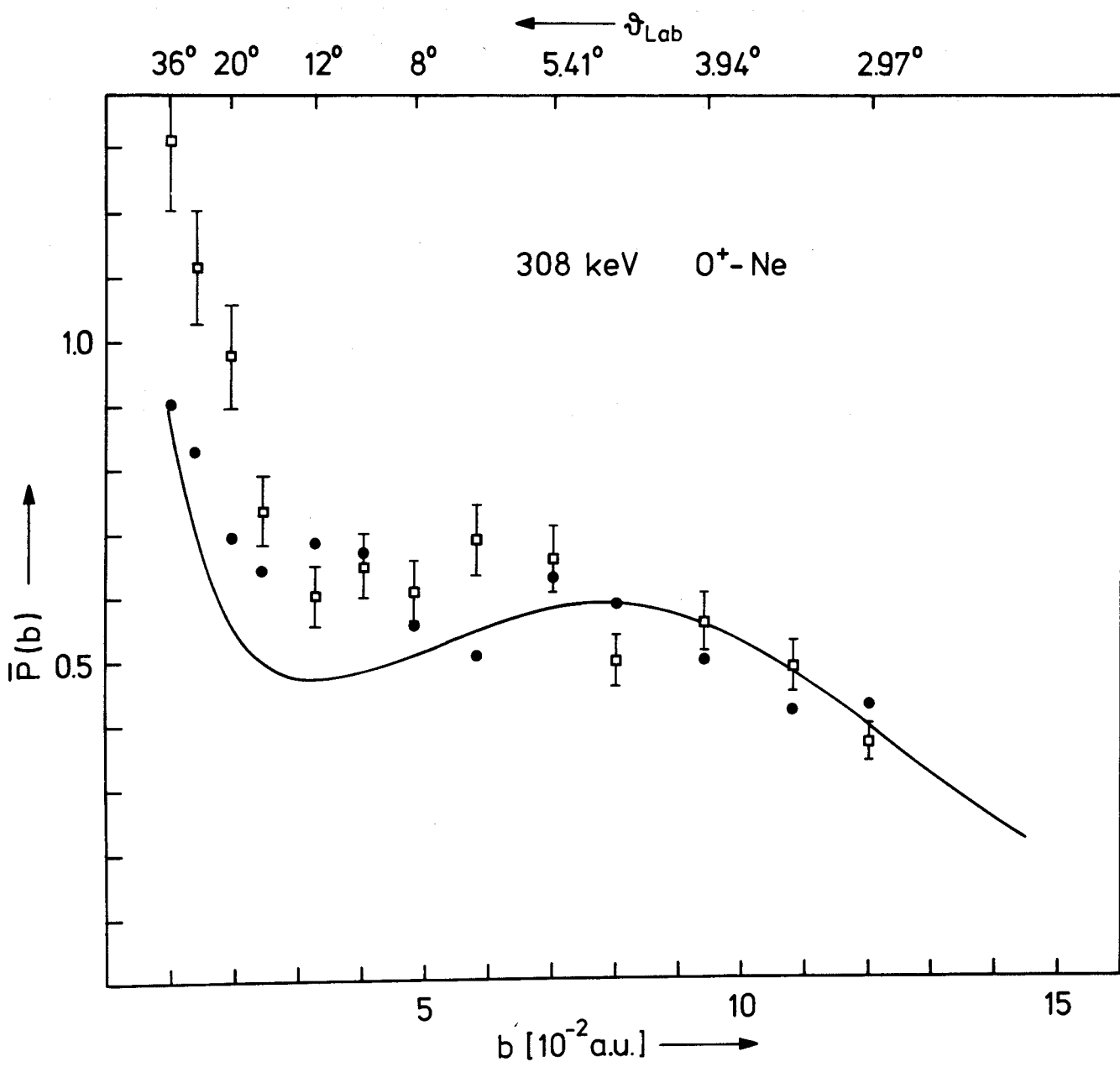


Abb.21

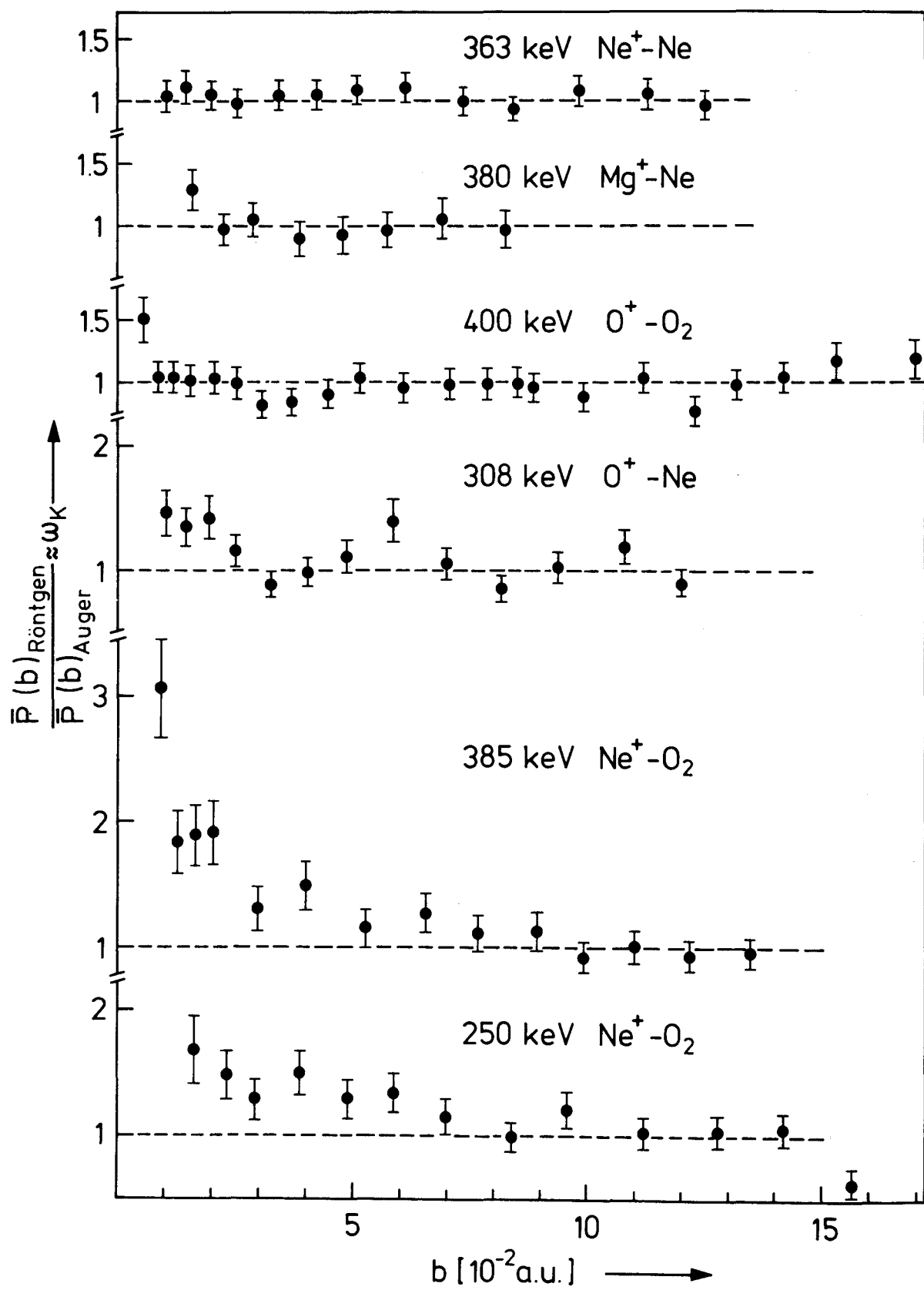


Abb.22

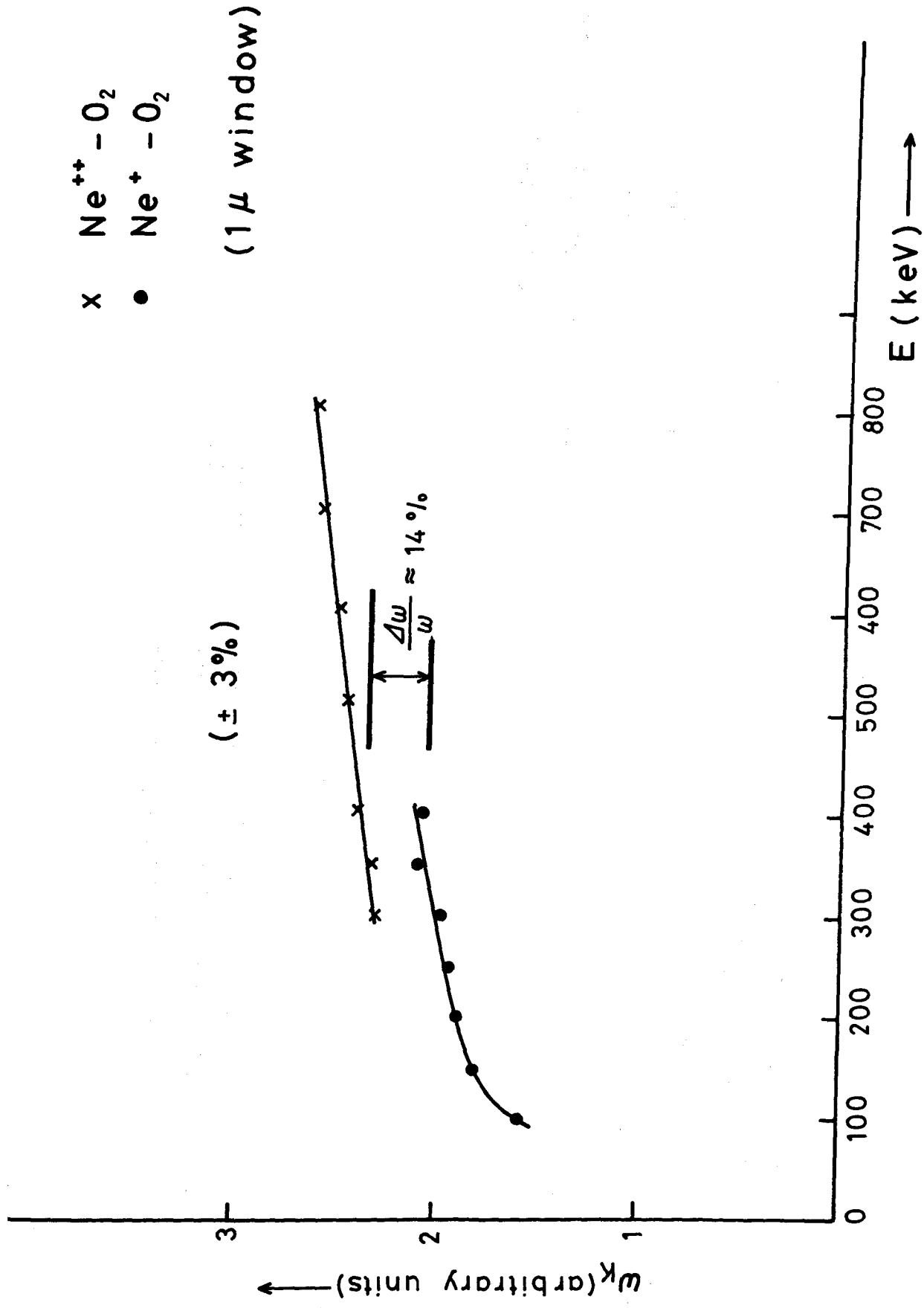


Abb. 23a

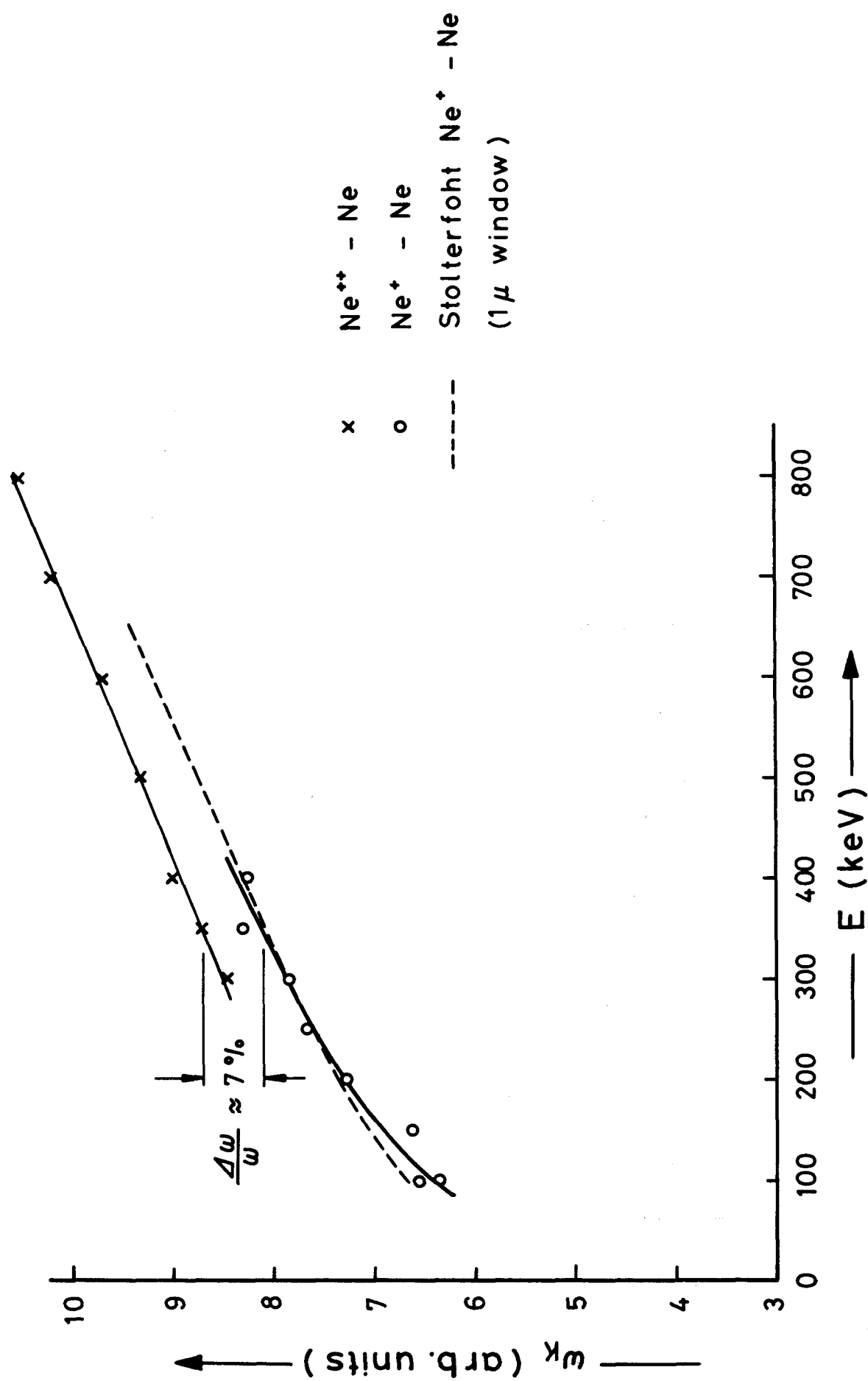


Abb.23b

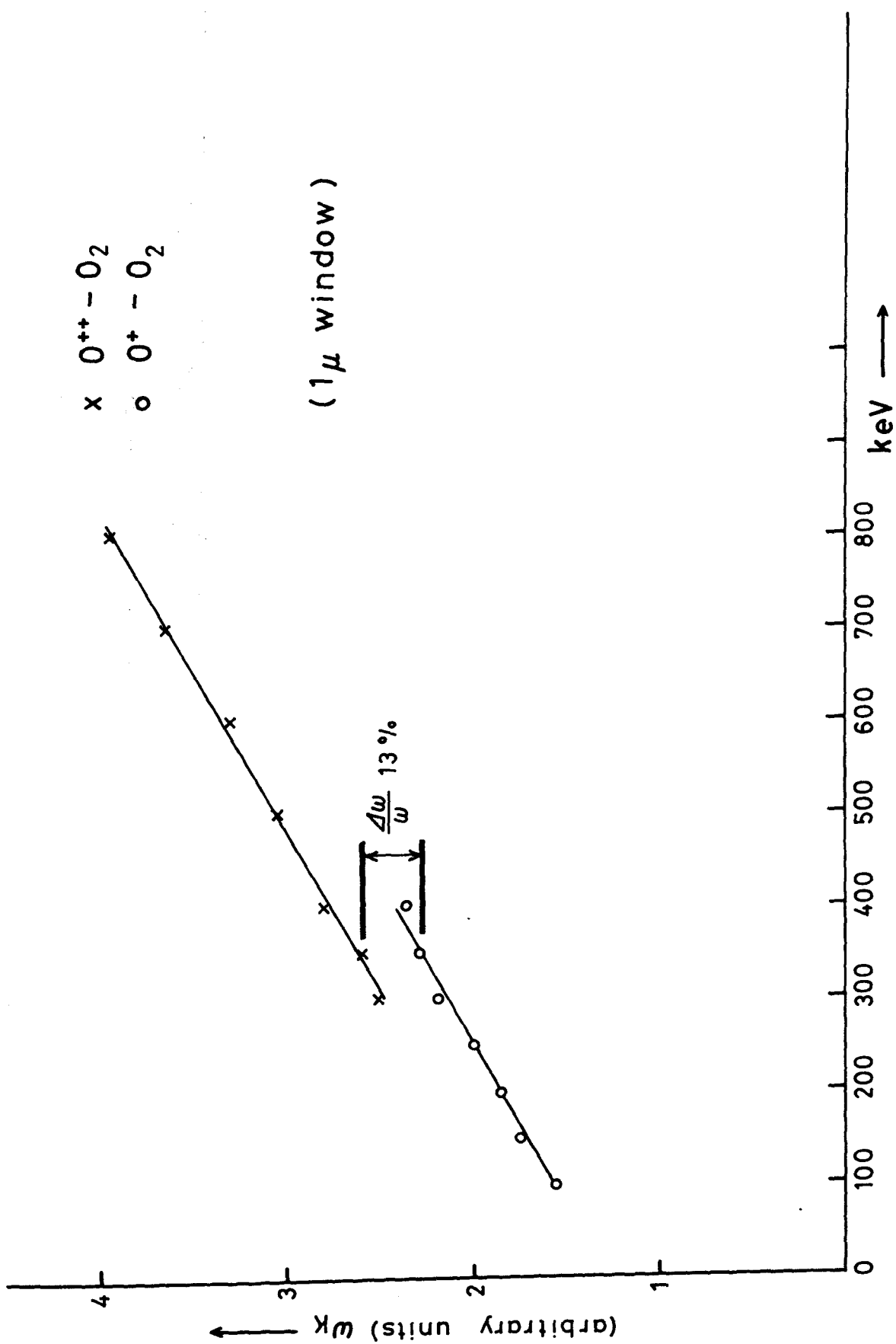


Abb. 23c

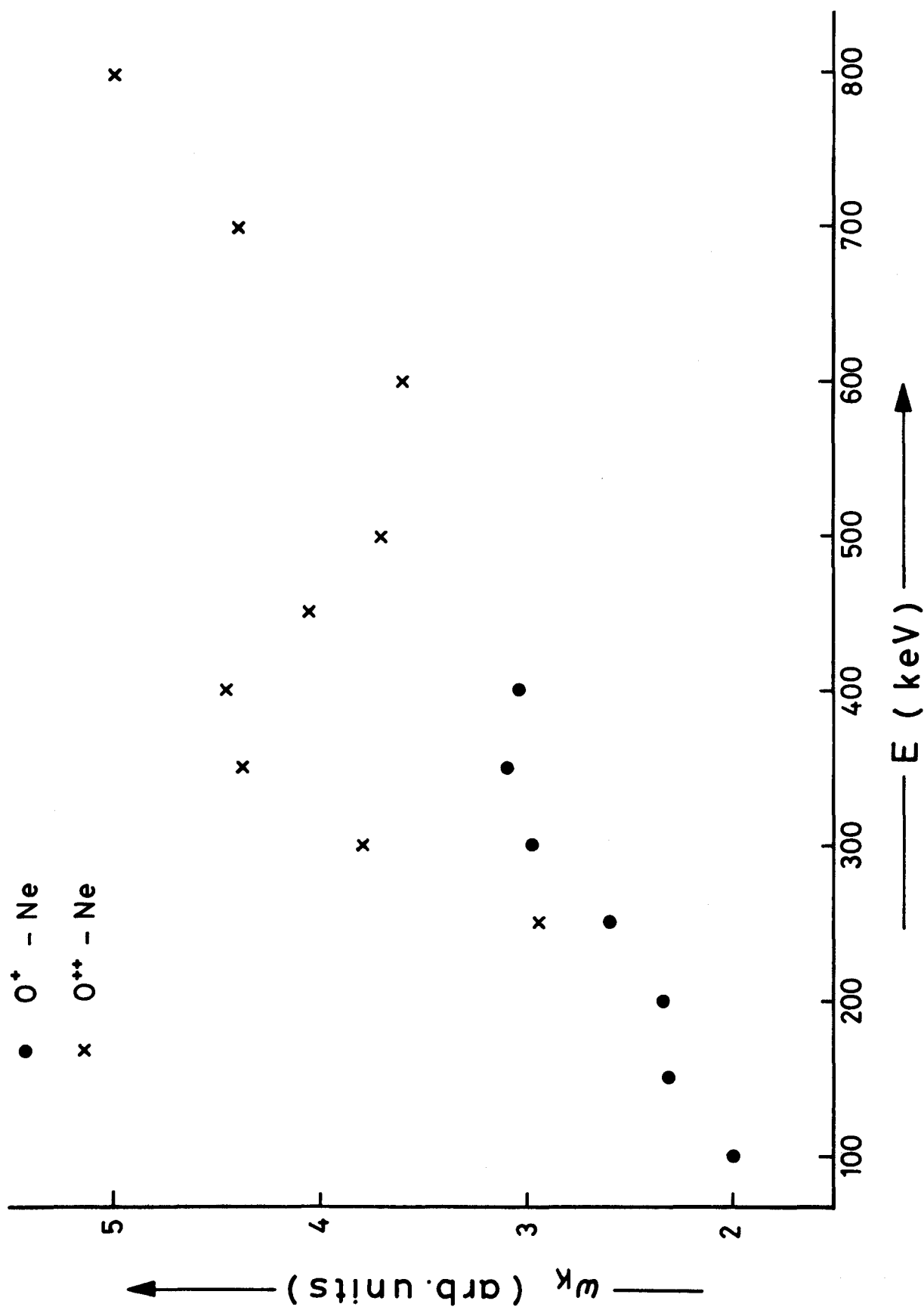


Abb. 23d

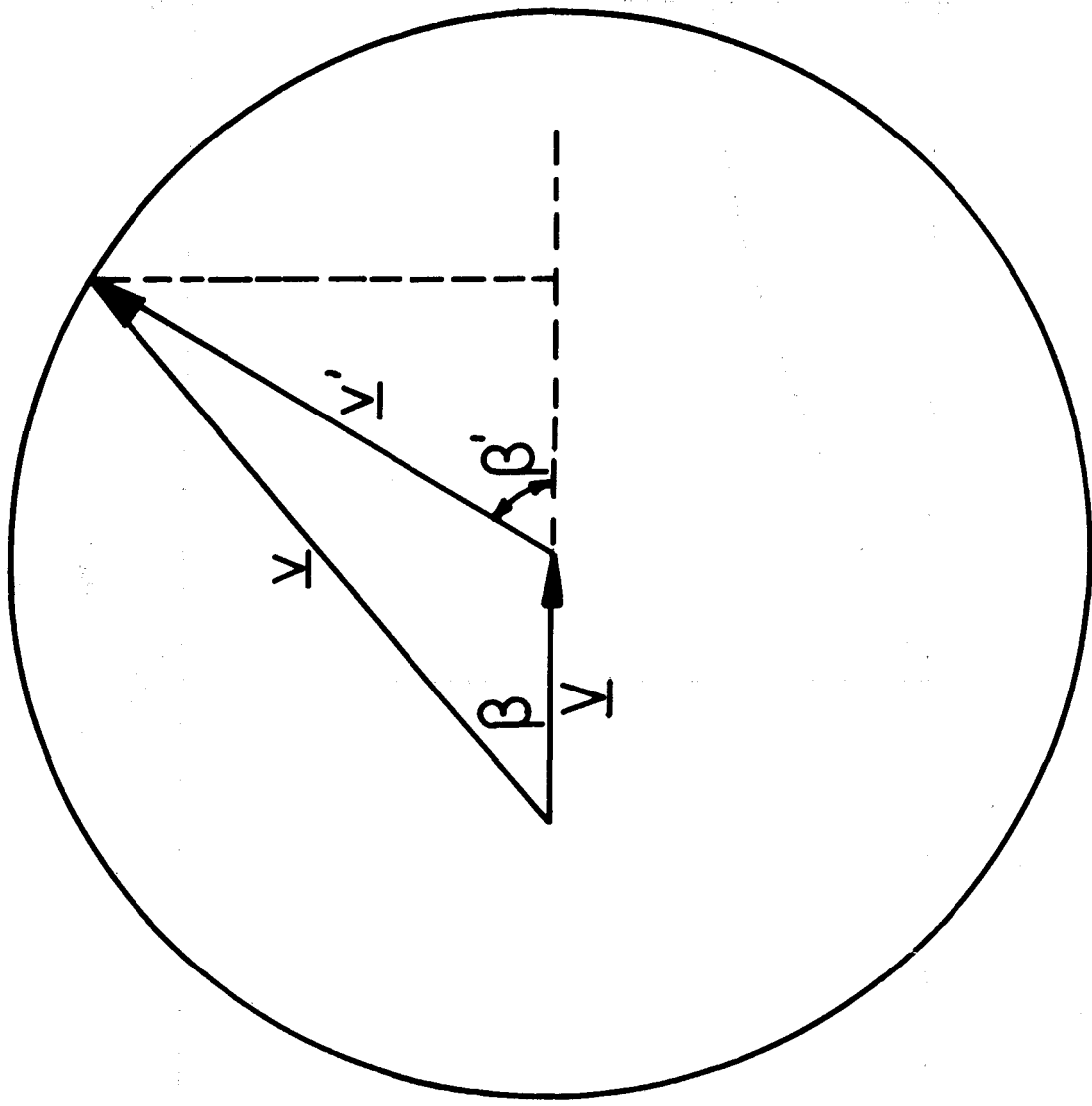


Abb. 24

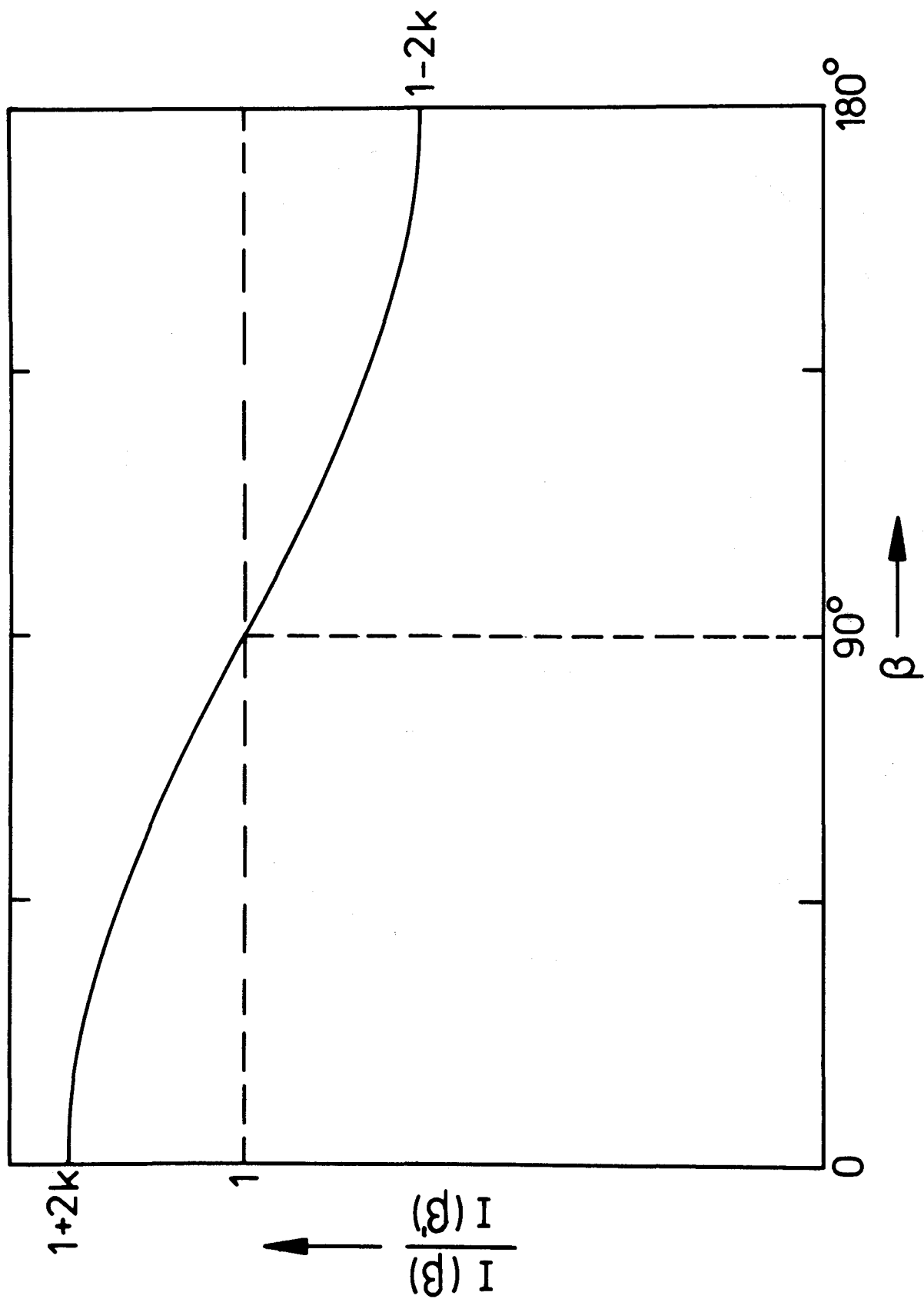


Abb. 25